



# ВОПРОСЫ МЕТОДИКИ ПРЕПОДАВАНИЯ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ В ВУЗЕ

В ПОМОЩЬ ПРЕПОДАВАТЕЛЮ XII

1988

ТАРТУСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

---

**ВОПРОСЫ МЕТОДИКИ  
ПРЕПОДАВАНИЯ КВАНТОВОЙ  
ФИЗИКИ В ВУЗЕ**

В ПОМОЩЬ ПРЕПОДАВАТЕЛЮ XII

---

ТАРТУ 1988

Утверждено на заседании совета физико-химического факультета 26 ноября 1986 года.

Ответственный редактор Д.Я. Лембра

О т р е д а к т о р а

В серии "В помощь преподавателю", издаваемой Тартуским государственным университетом с 1976 года, вышло уже восемь методических сборников по физике в следующей хронологической последовательности номеров: IУ (1978 г.), У (1980 г.), UI (1982 г.), УП (1982 г.), УШ (1983 г.), IX (1984 г.), X (1985 г.) и XI (1986 г.). В настоящий сборник включены статьи, составленные на основе методических разработок, выполненных в промежутке между УШ и IX научно-методической конференцией преподавателей физики вузов Прибалтийской зоны СССР. Сборник отличается от предыдущих повышенной долей статей по квантовой физике.

Arh.

Tartu ülikool

ASTUTATUD

matukogu

9863

ВОПРОСЫ МЕТОДИКИ ПРЕПОДАВАНИЯ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ В ВУЗЕ.

В помощь преподавателю XII.

На русском языке.

Тартуский государственный университет.

ЭССР, 202400, г.Тарту, ул.Оликобли, 18.

Ответственный редактор Д. Лембра.

Подписано к печати 21.01.1988.

МВ 00244.

Формат 60х84/16.

Бумага писчая.

Машинный. Ротапринт.

Условно-печатных листов 5,35.

Учетно-издательских листов 5,18. Печатных листов 5,75.

Тираж 200.

Заказ № 1100.

Цена 1 руб.

Типография ТГУ, ЭССР, 202400, г.Тарту, ул.Тийги, 78.

© Тартуский государственный университет, 1988

**К.-С.К. Ребана**

30 марта 1987 г. на 59-м году жизни скончался известный эстонский физик, д-р физ.-мат. наук, проф. Карл-Самуэль Карлович Ребана.

На протяжении четверти века К.-С.К.Ребана заведовал кафедрой экспериментальной физики, умело сочетая свой талант руководителя и мастерство преподавателя. Он читал студентам много курсов по разным разделам физики. В орбите его интересов всегда стояли и вопросы методики преподавания физики. Он был автором многих статей в сборнике "В помощь преподавателю".

К.-С.К. Ребана был создателем и научным руководителем лаборатории электролюминесценции и полупроводников ТТУ.

Его научные достижения по кинетике люминесценции полупроводников и электролюминесценции сульфида цинка получили широкое признание в СССР и за рубежом.

Кроме того, К.-С.К.Ребана был известным популяризатором физики, особенно среди учащейся молодежи.

Память о нем сохранится в сердцах тех, кто знал его и работал вместе с ним.



✠ Эксилибрис исполнен тар-тустским художником П. Лу-катсом в 1969 г.

## О СПОСОБАХ ДОСТИЖЕНИЯ РАЗНООБРАЗИЯ ПРИ ИЗЛОЖЕНИИ ЛЕКЦИОННОГО МАТЕРИАЛА

К.-С.К. Ребане

По общепризнанному мнению, лекция является основной формой изложения материала, который необходимо усвоить студентам по утвержденным программам [1, 2]. Часто лекции сопровождаются практическими, семинарскими и лабораторными занятиями. Эти формы обучения подчинены основной, ведущей роли лекции и служат, как правило, для подкрепления и иллюстрации материала лекции. Основная цель лекции – дать студентам определенное количество знаний. Обучение умению в явном или неявном виде часто остается на заднем плане. Без особого внимания остается также вопрос, как студент должен приобрести навыки для усвоения необходимого количества знаний.

Сами студенты более высоко оценивают именно те формы обучения, которые позволяют им развивать навыки, т.е. активные формы обучения (см., например, [3]). Студенты, как правило, не понимают того факта, что надо приобрести также умение излагать обучаемый материал, т.е. читать лекции или проводить беседу по материалам лекции. Одной из форм такого обучения является активное посещение и анализ лекции.

В [1, 2] указаны разные приемы, позволяющие активизировать лекцию, достичь разнообразия при изложении материала. Все они преследуют цель избежать превращения лекции в простое пересказывание материала учебника или конспекта (немецкое *Vorlesung*) и придать ей характер научного и педагогического творчества.

Традиционные лекции активизируют использованием плакатов, таблиц, рисунков, слайдов, фильмов. В последнее время широко распространяется применение на лекциях графопроектора с подготовленными ранее демонстрационными материалами [4].

Эта форма, действительно, существенно оживляет работу на лекциях. Однако недостатком данного метода является его малая гибкость, невозможность демонстрации того, что возникает в уме лектора по ходу лекции. Все материалы для графопроектора обычно уже заранее подготовлены, и это ставит лектора в достаточно жесткие (хотя и удобные) рамки. То же самое относится и к применению слайдов, кинофильмов. Творческое начало на лекциях, ориентированных на применение в основном этих методов с целью активизации учебного материала, остается все-таки ограниченным.

На кафедре экспериментальной физики ТГУ весь курс лекций основ радиозлектроники построен на применении снятых на диапозитивную пленку основных формул и схем [3]. Лектор сопровождает каждый кадр необходимыми пояснениями. Однако он дополнительно пользуется еще тем обстоятельством, что весь лекционный курс четко синхронизирован с практикумом и материал практикума органически входит в содержание курса. В результате на лекции обсуждаются не только теоретические вопросы, но также вопросы и задачи, о которых студенты имеют уже представление на основании выполненных в лаборатории работ. Достигается достаточно большое единство в обучении знания и умения.

Семинарская форма занятий достаточно распространена. Обычно она проводится на старших курсах, иногда в отрыве от лекции, иногда как часть, связанная с лекционным курсом. Нам кажется, что форму, подобную семинарским занятиям, можно использовать и для обогащения лекционной формы обучения студентов. Это можно делать так. Из лекционного курса можно выделить небольшие разделы и поручить разработать их самостоятельно (всей группе или только отдельным студентам) по обзорным статьям, монографиям, учебникам, малодоступным книгам и т.д. Результаты своей работы студенты оформляют письменно, и по выбору лектора кто-то из них в течение 5-15 минут докладывает группе во время лекции. Остальные студенты слушают, конспектируют и задают вопросы так же, как и в случае лекции преподавателя. Вначале преподаватель проверяет излагаемый материал. В дальнейшем, когда студенты привыкнут к такой форме работы, необходимость в предварительной проверке

отпадает. Как часто нужно организовывать такие выступления, решает преподаватель. В случае малых групп (при обучении спецпредметам) целесообразно, чтобы каждый студент мог выступать несколько раз. Но к такой форме следует привлекать студентов уже с младших курсов. В результате использования этого метода повышается активность студентов, они получают ценный опыт публичных выступлений, особенно по научно-техническим темам. Такой опыт у студентов практически отсутствует. Длительные выступления студентов, как показывает наш опыт, нецелесообразны. В этом случае трудно привлечь к подготовке доклада больше одного студента. Подготовка длинного доклада и его изложение требуют много времени и при этом другие студенты остаются пассивными. Каждое выступление студента должно оцениваться преподавателем, а еще лучше студентами.

В настоящее время самой популярной формой увеличения активности студентов на лекциях является применение проблемных лекций ([1, 2], см. также [6]). Но наряду с ними и вместе с ними возможны и другие виды лекции, как, например: лекция – беседа, лекция – полемика, лекция – дискуссия, лекция – фантазия. На лекциях можно провести контроль самостоятельной подготовки студентов, проверку знаний связей между различными частями курса или между различными дисциплинами. Необходимость постоянной проверки таких связей подтверждает работа [7]. Интересной формой занятий является лекция – экскурсия, которая в физических дисциплинах используется редко.

Мы часто забываем, что лекция является и формой воспитания студента. От использования на лекциях одного лишь изложения содержания материала программы нельзя ждать особого воспитательного эффекта. Поэтому часть времени лекции целесообразно превращать в форму беседы, привести разные примеры, воспоминания, связанные с излагаемым материалом. Студентам также надо дать возможность изложить свою точку зрения по обсуждаемому вопросу. Очень важно, чтобы лектор был хорошо знаком с историей физики, со сложными и иногда даже с первого взгляда непонятными путями физического познания, проблемами философии.

Материал на лекциях часто излагают как конечную истину.

Однако имеется много возможностей показать, какими противоречивыми путями достигается физическая истина. Выдвижение дискуссионных вопросов на лекции резко оживляет слушателей. Дискуссию можно развивать и на основе сравнения разных методов изложения одного и того же вопроса в разных учебниках, критикуя один метод или дискутируя с автором другого метода.

В свое время даже в некоторых учебниках материал по физике излагался в виде дискуссии или диалога между двумя собеседниками. Крупный физик-педагог Тартуского университета, профессор, член-корреспондент Петербургской Академии наук А.ф. Эттинген, например, написал в 1910 году свой учебник по физике именно в этом стиле [8]. Основой для развития хотя бы минимальных навыков диалога, дискуссии является взаимная заинтересованность и активность, а также минимальные предварительные знания со стороны учащегося (студента). Наши преподаватели могли не один раз убедиться, что у студентов такая заинтересованность и предварительная подготовка почти отсутствуют. Таким образом, задачей становится предварительная, долекционная активизация студентов. Наверно, уменьшение количества часов лекций должно компенсироваться подготовкой или комплектованием хороших печатных материалов для своего лекционного курса. При наличии таких материалов уже начиная с вводной лекции надо ориентировать студентов на то, чтобы каждый из них по имеющимся печатным материалам ознакомился с содержанием вопросов лекции. С подготовленными таким образом студентами лекцию можно провести совершенно по-другому, развивая в широком масштабе полемический, дискуссионный стиль и проверяя тем самым усвоение материала и развивая творческие начала у студентов. При этом, конечно, надо пересмотреть все рекомендации к нормам самостоятельной работы студентов (см., например, [9]) в пользу их увеличения.

Очень существенным является развитие и обучение студентов сообразительности, основам научной фантазии. На это обратили внимание многие ученые, которые занимались вопросами изучения творческого начала [10, 11]. Поэтому целесообразно, чтобы преподаватель иногда уходил от строгого физического изложения материала и рассматривал некоторые аспекты разви-



тия физики или науки в целом. Иногда это базируется чисто на фантазии преподавателя, но иногда может быть совсем близко к научной прогностике. Нами в курсе "Введение в специальность" такая фантастика развивалась на примере оценки будущего педагогической науки [12]. Оказалось, что интерес студентов к теме сразу увеличился, возникли вопросы, началась дискуссия. Отношение студентов к подготовке преподавателей физики как важной задаче физических факультетов стало другим, и эта тема принималась студентами с вниманием.

С развитием вычислительной техники открываются огромные возможности увеличения разнообразия в лекционном процессе. Некоторые аспекты применения ЭВМ в преподавании физики рассмотрены недавно в [13]. В лекционном курсе можно прямо в ходе лекции моделировать разные физические процессы и на базе анализа полученных формул и варьирования параметров получить наглядное изображение изучаемых процессов. Это особенно ценно при изучении неравновесных процессов и кинетики разных явлений. К сожалению, в настоящее время почти все важные формулы математической и теоретической физики остаются в лекционных курсах без должной иллюстрации. В книге [14] приводятся разные применения ЭВМ для развития познавательного процесса. По аналогии с ними можно оживить лекционный процесс, применяя технику ЭВМ. Эта тематика настолько широка и важна, что ей следует посвятить целый ряд статей. Новые возможности оживления лекционного курса дает появление персональных ЭВМ. В нашем университете уже работают два десятка персональных ЭВМ "Тарту". Недалек тот час, когда все физические аудитории можно будет оснастить такими ЭВМ.

В настоящей работе было указано лишь на некоторые возможности увеличения разнообразия на лекциях. Нет сомнения, что таких возможностей гораздо больше. Их надо только умело применять.

#### Л и т е р а т у р а

1. Осачук Л.А. Методика преподавания физики. - Киев-Одесса: Головное изд-во изд. об-ния "Вища шк.", 1984. - 351 с.
2. Ruttas V. Aktiivsuse materjalist, vormist ja sisust kõrgkooli õppe-kaasvatusprotsessis // Üliõpilaste ak-

tiviseerimine õppe-kasvatusprotsessis: Metoodiliste materjalide kogumik. - Tallinn, 1983. - lk. 21-23.

3. Мелешина А.М., Зотова И.К. О преподавании физики в вузе. - Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та, 1983. - 136 с.
4. Тамм Е. Mõningate tehniliste õppevahendite rakendusõhismõtetest õppetöös // Üliõpilaste aktiviseerimine õppe-kasvatusprotsessis: Metoodiliste materjalide kogumik. - Tallinn, 1983. - lk. 38-40.
5. Васильченко В.П. Опыт использования диапозитивов при чтении лекции по радиэлектронике // Методика преподавания в вузе. В помощь преподавателю УІ.- Тарту, 1982. - С. 41-43.
6. Хелленурме П.А. Проблемные лекции в курсе общей физики // Методика преподавания в вузе. В помощь преподавателю УІІІ. - Тарту, 1983. - С. 74-80.
7. Нымм У.Х. О необходимости и методах закрепления в сознании студентов основных физико-математических понятий // Методика преподавания физики в вузе. В помощь преподавателю Х. - Тарту, 1985. - С. 51-55.
8. Oettingen A.v. Die Schule der Physik.-Braunschweig: Vieweg, 1910. - 622 S.
9. Салунди М. О некоторых аспектах самостоятельной работы студентов // Вопросы нормирования самостоятельной работы студентов. - Тарту, 1983. - С. 9-12.
10. Mägi V. Ainus ehtne münt. - Tallinn: Valgus, 1984. - 144 lk.
11. Ван Эйкен А. Развитие творчества в науке // Импакт. - 1985. - № 2. - С. 59-66.
12. Sisesejuhatuse erialasse: Füüsika 2016: Metoodiline juhend / Koost. K.-S. Rebane. - Tartu, 1985. - 59 lk.
13. Таммет Х.Ф. Синтез задач с помощью ЭВМ и преподавание физики в вузе // Методика преподавания физики в вузе. В помощь преподавателю ІХ. - Тарту, 1984. - С. 55-61.
14. Шапиро С.И. Мышление человека и переработка информации ЭВМ. - М.: Сов. радио, 1980. - 288 с.

## УРАВНЕНИЯ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ

П.Л. Кукк, Р.Р. Лойде, Э.К. Рейтер

Изложение основ квантовой механики в соответствующем разделе курса общей физики протекает от частного к общему, поскольку: а) классическая физика является частным случаем квантовой физики; б) вследствие большей сложности студенты знакомятся с квантовой физикой только после усвоения основ классической физики. Сложившаяся ситуация обладает, однако, тем недостатком, что новые (квантовые) уравнения не могут быть логически выведены из старых (классических) уравнений. Поэтому приходится на время отложить в сторону все то, что накоплено при изучении курса классической физики, усвоить новую, менее наглядную, теорию, а затем для предельных случаев (большие массы, малые скорости) получить из нее приближенный вариант — классическую физику. По образному выражению Ю.Б. Румера: "Мы вошли в здание ФИЗИКИ с заднего хода, теперь следует нам из него выйти и заново войти, но уже с парадного входа". Но иногда, пользуясь чисто формальными приемами, удастся связать "вывод" новых уравнений со старыми. Примером может служить стационарное уравнение Шредингера.

Исходим из того, что основное уравнение квантовой физики должно учитывать две формы проявления материи — волновую и корпускулярную [1, 2]. Волновое уравнение в классической физике описывается уравнением Даламбера [3]:

$$\Delta \varphi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0, \quad (1)$$

где  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  — оператор Лапласа;  $\varphi$  — волновая функция,  $v$  — скорость распространения волны.

Пусть  $\varphi(\vec{r}, t)$  соответствует монохроматической волне, тогда:

$$\varphi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-i\omega t}, \quad (2)$$

где  $\psi(\vec{r})$  — амплитудная часть  $\varphi(\vec{r}, t)$ ;  $i$  — мнимая единица;  $\omega$  — круговая частота.

Подставим (2) в (1) и, сократив на  $e^{-i\omega t}$ , получаем:

$$\Delta \psi(\vec{r}) + \left(\frac{\omega}{v}\right)^2 \psi(\vec{r}) = 0 \quad (3)$$

Заметим, что

$$\left(\frac{\omega}{v}\right)^2 = k^2, \quad (4)$$

где  $k$  — волновое число.

Для замкнутой консервативной системы частиц (корпускул) имеем в классической физике уравнение закона сохранения энергии:

$$E_k + U = E = \text{const}, \quad (5)$$

где  $E_k$  — кинетическая энергия,  $U$  — потенциальная энергия,  $E$  — полная энергия системы.

Заменив в (5)  $E_k$  через импульс  $p$  и массу  $m$ , получаем:

$$\frac{p^2}{2m} + U = E. \quad (6)$$

Теперь следует объединить (3) и (6). В классической физике такое объединяющее звено отсутствует. Позаимствуем его из квантовой физики. Это — соотношение Эйнштейна:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad (7)$$

где  $\hbar$  — постоянная Планка.

Подставляя (3) с помощью (4) и (7) в (6) и проведя несложные преобразования, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + U \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (8)$$

или

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U\right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (9)$$

Учитывая, что

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U = \hat{H}, \quad (10)$$

где  $\hat{H}$  — оператор Гамильтона (оператор полной энергии системы), получаем стационарное уравнение Шредингера (9) в операторной форме:

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}). \quad (11)$$

Установление стационарного уравнения Шредингера (II) является формальным, поскольку (7) не содержится в классической физике.

Далее следует рассмотреть основные положения операторного исчисления и показать, что уравнение (II) является проблемой нахождения собственных значений оператора  $\hat{H}$ . При этом  $\psi$  — собственные функции оператора, а  $E$  — собственные значения оператора  $\hat{H}$ .

Решение уравнения (II) заключается в нахождении функций  $\psi$ , вид которых не изменится при воздействии на них оператора  $\hat{H}$ . Это и есть собственные функции оператора.

Обобщив полученный результат, приходим к заключению, что уравнения квантовой физики — это операторные уравнения: проблемы по нахождению собственных функций операторов.

Отсюда приходим к постулатам квантовой физики:

1. Каждой физической величине ставится в соответствие определенный оператор (полной энергии в стационарном случае — оператор Гамильтона).

2. Операторное уравнение типа (II) описывает процесс измерения физической величины, которой поставлен в соответствие данный оператор.

3. В результате измерения получаются только те значения физической величины, которые являются собственными значениями оператора (в случае стационарного уравнения Шредингера — это значения полной энергии  $E$ ).

Далее следует конкретизировать требования, предъявляемые к операторам в квантовой физике. В частности, поскольку собственные значения этих операторов — численные результаты измерения физических величин, являющиеся действительными числами, то собственные значения квантовых операторов должны быть действительными числами. Такими операторами являются эрмитовы операторы.

Вид волновой функции описывает состояние квантовой системы, а квадрат ее модуля  $|\psi|^2 = \psi^* \psi$  — плотность распределения вероятности нахождения квантовой частицы в области определения, если выполнено условие нормировки:

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx \, dy \, dz = 1 \quad (12)$$

Необходимость пользоваться плотностью вероятности, следовательно и волновой функцией продиктована статистическим — вероятностным — характером квантовых законов. Например, если система находится в состоянии, в котором ее полная энергия имеет вполне определенное значение, то относительно ее координат мы можем судить только по распределению плотности вероятности  $\psi^* \psi$ . Область, в которой эта плотность существенно отлична от нуля, называется областью определения. Внутри этой области функция  $\psi^* \psi$  дает регионы равного значения  $\psi^* \psi$ , т.е. получаем нечто подобное топографической карте местности, где замкнутые кривые соответствуют равной высоте над уровнем моря. Понятно, что наибольший интерес представляет та часть области определения, где  $\psi^* \psi$  имеет максимальное значение. Например, в случае атома водорода область максимального значения  $\psi^* \psi$  соответствует боровской орбите электрона.

Уравнение типа (II) имеет в качестве решения целое семейство (иногда бесконечно много) собственных функций и собственных значений оператора. Их удобно перенумеровать, ставя соответствующие индексы, — это квантовые числа. Например, состояние электрона в атоме характеризуется четверкой квантовых чисел:  $n$  (главное),  $l$  (орбитальное),  $j$  (внутреннее),  $m_j$  (квантует проекцию суммарного момента количества движения электрона на направление оси  $z$ ).

Таким образом, мы пришли к заключению, что для описания квантовых систем необходимы и волновая функция (иногда называется функцией состояния или просто  $\psi$ -функцией), и квантовые числа, и понятие состояния и, наконец, операторные уравнения, которых не было в классической физике.

Теперь разберем, куда девались эти понятия в классической физике, почему их там нет?

Сначала покажем, что уравнение Шредингера (II) при переходе к классической физике превращается в знакомое уравнение второго закона Ньютона. Для этого воспользуемся правилом: операторы заменяются их собственными значениями:

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta & \quad (\text{оператор кинетической энергии}) \rightarrow \frac{p^2}{2m} \\ \hat{U} & \quad (\text{оператор потенциальной энергии}) \rightarrow U \end{aligned} \right\} \quad (I3)$$

а область определения сужается в точку, т. е. вероятность нахождения в этой точке равна 1, во всем остальном пространстве — нулю. В таком приближении можно  $|\psi|^2$  рассматривать как вероятность. Таким образом  $|\psi|^2$ , следовательно,  $\psi$  и превращается в

$$\psi(x, y, z) = \begin{cases} 1, & x = x_0, y = y_0, z = z_0 \\ 0, & x \neq x_0, y \neq y_0, z \neq z_0. \end{cases} \quad (14)$$

Совокупность этих точек представляет собой привычную в классическом понятии траекторию материальной точки. Следовательно, если система имеет энергию  $E$ , то она находится в точке  $x_0, y_0, z_0$ , т. е.  $\psi(x_0, y_0, z_0) = 1$ . Таким образом, кроме замены операторов на их собственные значения, мы заменим  $\psi$  — функцию единицей. Тогда уравнение (9) превращается в закон сохранения энергии (6). Берем из обеих частей уравнения (6) производную по времени

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{r^2}{2m} \right) + \frac{dU}{dt} = 0 \quad (15)$$

или

$$\vec{r} \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{d\vec{r}}{dt} = 0 \quad (16)$$

Здесь учтено, что в стационарном случае  $U$  непосредственно от времени не зависит, а зависит только через координаты. Заменив  $\vec{r} = m \vec{v}$ , получим

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} = 0 \quad (17)$$

или

$$m \vec{a} - \vec{F} = 0, \quad (18)$$

где  $\vec{F}$  — действующая сила.

Таким образом, поскольку в классической физике все физические параметры имеют одновременно точное значение, вероятностное утверждение заменяется категорическим: "да" или "нет".

Наше рассмотрение классического предела здесь не строгое, но довольно наглядное. Строгий анализ выходит за пределы курса общей физики.

Итак, приведенный нами ход рассуждений направлен на преодоление того психологического барьера, который возникает у слушателей, когда, стоя на привычных классических позици-

ях, пытаются объяснить квантовые законы и уравнения.

#### Л и т е р а т у р а

1. Ярив А. Введение в теорию и приложения квантовой механики. - М., 1984.
2. Ферми Э. Квантовая механика. - М., 1968.
3. Соколов А.А. и др. Квантовая механика. - М., 1962.



## НЕКОТОРЫЕ МЕТОДИЧЕСКИЕ ПРИЕМЫ ПРИ ПРЕПОДАВАНИИ АТОМНОЙ ФИЗИКИ

### IX

Ю.Я. Лембра

#### 22. Электрический заряд атомного ядра

Из курсов физики и химии средней школы студенты обычно помнят, что электрический заряд атомного ядра подчиняется закономерности

$$q_N = Ze, \quad (I)$$

где  $Z$  — порядковый номер элемента в периодической системе Д.И. Менделеева, а  $e$  — элементарный электрический заряд. Однако установлению этого положения в вузовской учебной литературе уделяется недостаточное внимание.

По нашему мнению, следует по крайней мере при преподавании атомной физики студентам физических специальностей внедрять историко-физические исследования [1, 2], в которых показано, что впервые к закономерности (I) пришел в 1913 г. голландский ученый Антониус Ван ден Брук (Van den Broek, 1870-1926) (см. также [3, с. 55]). По образованию Ван ден Брук был юристом, в начале XX в. его научные интересы переместились в физику.

В принципе можно было бы заряд ядра определить из опыта Резерфорда 1911 г. (см., например, [4, с. 55]). Однако уровень экспериментальной техники того времени не позволил найти для формулы Резерфорда исходные данные с такой точностью, чтобы достоверно установить закономерность (I). Ван ден Бруку удалось решение этого вопроса получить косвенным путем. При преподавании этого вопроса в общем курсе нет возможности остановиться на всех деталях его рассуждений. По-видимому, здесь наиболее убедительным является толкование, связанное с радио-

активными рядами. Поскольку данный вопрос обычно излагается во вводной лекции по атомной физике, то сперва студентам надо сообщить экспериментальный факт, что при радиоактивном распаде ядро испускает либо  $\alpha$ -частицу, либо электрон. Этим готовится почва для изложения открытия Ван ден Брука. Он заметил, что если измерить заряды  $\alpha$ -частицы и электрона в единицах элементарного электрического заряда, то сумма зарядов испущенных  $\alpha$ -частиц и электронов в данном радиоактивном ряду равна разности порядковых номеров первого и последнего элементов. Если учесть закон сохранения электрического заряда и спонтанный характер радиоактивного распада, то отсюда непосредственно вытекает идея закономерности (I). Этот результат использовал в 1913 г. в своих исследованиях Н. Бор [2, с. 113], [5, с. 85]. После этого в 1913-1914 гг. Г. Мозли установил зависимость частоты характеристического рентгеновского излучения элемента от его порядкового номера и экспериментально доказал справедливость закономерности (I).

По образному выражению [2, с. 113] гипотеза Ван ден Брука вдохнула жизнь в модель атома Резерфорда, указав для нее важнейшую количественную характеристику. Установление закономерности (I) можно назвать открытием Ван ден Брука-Мозли.

Отметим, что в обзоре [6], посвященном столетию со дня рождения Н. Бора, подчеркивается роль Ван ден Брука в развитии атомной физики. Однако странным является то, что в другом недавнем обзоре [7], в котором кроме моделей Томсона и Резерфорда излагаются еще многие модели атома, возникшие в начале XX в., ничего не говорится о Ван ден Бруке.

В заключение этого раздела сделаем комментарий краеведческого характера для нашей зоны проведения научно-методических семинаров. Эти сведения можно при желании использовать для оживления чтения лекций. В [8] сообщается, что в г. Минске найден принадлежащий Ван ден Бруку комплект номеров журнала "Philosophical Magazine" с пометками ученого. На выставке литературы "75 лет планетарной модели атома", организованной весной 1986 г. в библиотеке физического отделения ТГУ, нам удалось экспонировать работу Ван ден Брука [9].

### 23. Словесные формулировки понятий

В учебной литературе по атомной физике обычно не уделяется должного внимания словесным формулировкам понятий. В условиях современной научно-технической революции, когда осуществляется массовая подготовка специалистов, следует искать резервы, которые обеспечивали бы активное участие как зрительной, так и слуховой памяти обучаемых. Исходя из этой точки зрения, мы советуем на лекциях по атомной физике параллельно с определениями понятий с помощью формул привести также по возможности четкие словесные определения. Здесь, конечно, имеются определенные затруднения по сравнению с классической физикой. Ведь, образно говоря, многие понятия классической физики списаны с быта.

При выдвижении нашей методики мы, безусловно, учитываем, что основным педагогическим принципом, гарантирующим успех усвоения материала, является первичность идеи и вторичность наказания. Однако, с другой стороны, бессистемность в названиях мешает усвоению основных идей.

Обычно в учебной литературе отсутствует общее словесное определение понятия квантовых чисел. Для студентов-физиков III курса мы используем следующее определение: целые или полужелые числа, характеризующие собственные значения операторов физических величин, называют квантовыми числами. Для студентов остальных специальностей, в программу которых не входят операторы, можно привести более простую формулировку, подразумевая под квантовыми числами целые или полужелые числа, определяющие возможные значения физических величин, характеризующих квантовые системы.

Часто при описании орбитального момента импульса электрона в учебной литературе приводят формулы типа:

$$|\vec{M}_l| = k \sqrt{l(l+1)} \quad (2)$$

$$M_{lz} = k m_l \quad (3)$$

где

$$m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l, \quad (4)$$

а после этого просто пишут, что  $l$  называется орбитальным и  $m_l$  — орбитальным магнитным квантовым числом электрона. Мы со-

ветуем поступать следующим образом. Целое неотрицательное число, определяющее абсолютную величину орбитального момента импульса электрона, называется орбитальным (или азимутальным) квантовым числом электрона. Целое число, определяющее проекцию орбитального момента импульса электрона, называется орбитальным магнитным числом электрона. При изучении электронной оболочки атома возникает проблема сложения моментов импульса. Учитывая квантово-механическое правило сложения моментов импульса, введем орбитальное квантовое число электронной оболочки (обозначение  $L$ ) как целое неотрицательное число, определяющее абсолютную величину орбитального момента импульса электронной оболочки. Аналогично целое число, определяющее проекцию орбитального момента импульса электронной оболочки, называется орбитальным магнитным квантовым числом электронной оболочки (обозначение  $m_L$ ).

Переходим к рассмотрению квантовых чисел, связанных со спином. Для учебных целей, особенно при обучении студентов нефизических специальностей, мы советуем термин "спин" использовать для свойства элементарной частицы, а количественные характеристики снабдить приставкой "спиновое". Тогда терминология квантовых чисел станет совершенно аналогичной ранее изложенной. Спиновое квантовое число (обозначение  $s$ ) частицы рассмотрим как неотрицательное целое или положительное полуцелое число, определяющее абсолютную величину спинового момента импульса частицы. В научной литературе величина  $s$  называется просто спином частицы. Спиновое магнитное квантовое число (обозначение  $m_s$ ) определяет проекцию спинового момента импульса. Аналогия проявляется в том, что в формулах (2) – (4) можно везде сделать подстановку  $l \rightarrow s$ . Надо привести важные примеры: для электрона  $s = 1/2$  и для фотона  $s = 1$ . В некоторых учебниках квантовое число  $m_s$  для электрона называется просто спиновым квантовым числом. Такой вариант следует считать неудачным, так как в дальнейшем при изучении раздела физики элементарных частиц возникает путаница в терминологии.

На примере электрона в атоме возникает проблема сложения орбитального и спинового моментов импульса. Квантовое число, определяющее полный момент импульса электрона, назы-

вается внутренним квантовым числом электрона (обозначение  $j$ ). Это название устарело. До тех пор, пока новый подходящий термин не предложен, следует этот термин по примеру [10, с. 243] использовать последовательно. А именно: полуцелое число, определяющее проекцию полного момента импульса электрона, называется его внутренним магнитным квантовым числом.

Если в атоме действует  $(L, S)$ -связь, как это бывает в большинстве случаев, то возникает также проблема сложения спиновых моментов импульса электронов. Квантовое число, которое определяет абсолютную величину спинового момента импульса электронной оболочки, называем спиновым квантовым числом электронной оболочки (обозначение  $S$ ). Если число электронов в атоме четное (соотв. нечетное), то  $S$  будет неотрицательным целым (соотв. положительным полуцелым) числом. При сложении орбитального и спинового моментов импульса электронной оболочки возникает полный момент импульса электронной оболочки. Квантовые числа, определяющие абсолютную величину и проекцию полученного момента импульса, называем соответственно внутренним и внутренним магнитным квантовыми числами электронной оболочки (обозначения  $j$  и  $m_j$ ).

В [11, с. 759] квантовые числа  $L$ ,  $S$  и  $j$  называются суммарными орбитальным, спиновым и внутренним квантовыми числами атома. По нашему мнению, эти термины являются несколько неудачными, так как понятие "суммарное атома" требует еще учета свойств ядра. К сожалению, 17-е издание справочника Х. Кухлинга [12], выпущенное в 1985 г., еще распространяет систему определений квантовых чисел, опирающуюся на теорию Бора. Перевод 15-го издания выполнен в 1982 г. издательством "Мир", однако редактор не внес изменений в сторону усовершенствования текста.

В связи с термином "спиновое квантовое число" обращаем внимание на одну существенную деталь. Существует традиция, на основе которой спиновым квантовым числом ядра называется квантовое число, определяющее абсолютную величину полного момента импульса ядра, т.е. здесь учитывается сумма как спиновых, так и орбитальных моментов импульса нуклонов. Такое толкование спинового квантового числа распространяется также на другие сложные частицы (см. подробнее, например, [13], раздел 17).

На лекциях следует подчеркивать, что квантовые числа, определяющие абсолютную величину момента импульса, являются неотрицательными, а квантовые числа, определяющие проекцию момента импульса, могут быть также отрицательными. Истина является здесь, конечно, тривиальной. Однако тот факт, что ее надо постоянно повторять, говорит о том, как сильно для обычного студента ощущается различие между "квантовой картошкой" и "классическим яблоком".

Главное квантовое число электрона в атоме водорода введем как положительное целое число, определяющее энергию электрона. Более трудным является понятие квантового числа в остальных атомах. Главное квантовое число электрона в сложном атоме можно рассматривать как целое число, которое вместе с орбитальным квантовым числом определяет энергию электрона. При изучении молекул введем аналогично колебательное и вращательное квантовые числа.

Перейдем теперь к рассмотрению некоторых определений вне области квантовых чисел.

Радиус Бора является естественной квантовой единицей длины в атомной физике. Его словесное определение надо привести, исходя из квантово-механической точки зрения. Радиус Бора есть наиболее вероятное расстояние электрона от ядра в основном состоянии атома водорода. Напомним, что в [I4] (раздел I3) мы уже внесли предложение об исключении постулатов Бора из преподавания. В [I4] показано, что соответствующий учебный материал, содержащий две важные закономерности квантовой механики, с помощью обычных методических приемов можно излагать без привлечения понятия постулата. Косвенную поддержку нашему предложению можно получить и из обзора [6].

Приведем такое словесное определение радиальной волновой функции. В выражении полной волновой функции, описывающей движение частицы в центрально-симметричном поле, тот множитель, который зависит только от расстояния между частицей и центром поля, называется радиальной волновой функцией.

Конечно, встречаются понятия, не поддающиеся простому словесному определению. Так, например, величина  $2S+1$  называется мультиплетностью термина. Только в случае  $S \leq L$  мультиплетность показывает, на какое число уровней расщепляется

терм из-за спин-орбитального взаимодействия.

В стандартную программу атомной физики входят также вопросы, связанные со строением молекулы. В общем курсе физики эта проблематика изучается на примере двухатомной молекулы. Ниже приведем для этого случая некоторые словесные определения, отсутствующие в учебной литературе. Исходим из обычного определения адиабатического приближения. Потенциальной кривой молекулы называется кривая, показывающая зависимость собственного значения гамильтониана адиабатического приближения от межъядерного расстояния. Электронной энергией молекулы называется минимальное значение собственного значения гамильтониана адиабатического приближения. Силую постоянную молекулы толкуем как вторую производную потенциальной кривой в точке ее минимума. Нулевая колебательная энергия определяется как минимальное значение колебательной энергии. Здесь слово "нулевое" указывает на то, что колебательное квантовое число равняется нулю.

Наш опыт показал, что изложенная здесь методика особенно эффективна при обучении менее способных студентов. Сильные студенты способны усвоить сущность вопросов без дополнительных указаний. Изложенную методику мы постарались использовать при написании учебных пособий [15, 16].\*

### Л и т е р а т у р а

1. Лисневский Ю.И. Антониус Ван ден Брук. - М.: Наука, 1981.
2. Лисневский Ю.И. Атомные веса и возникновение ядерной физики. - М.: Наука, 1984.
3. Храмов Ю.А. Физики: Биографический справочник. - М.: Наука, 1983.
4. Белый М.У., Охрименко Б.А. Атомная физика. - Киев: Вища школа. 1984.
5. Трифонов Д.Н. и др. Учение о периодичности и учение о радиоактивности. - М.: Атомиздат, 1974.
6. Ельяшевич М.А. Развитие Нильсом Бором квантовой теории атома и принципа соответствия // УФН. - 1985. - Т. 147, № 2. - С. 253-301.

\* После сдачи нашей статьи в печать вышел в свет учебник [17]. Названия квантовых чисел момента импульса по [17, с. 235] не выбраны рациональным способом. В них отсутствует симметрия, подчеркнутая в разделе 23 нашей работы.

7. Hoffmann D. Von Entdeckung des Elektrons bis zur quanten-theoretischen Erkenntnis der Atomstrukturen // Phys. Schule. - 1985. Bd.-23, N 9. - S. 321-327.
8. Лисневский Ю.И. Новые материалы о жизни и творчестве А. Ван ден Брука // Вопросы истории естествознания и техники. - 1984. - № 1. - С. 107-113.
9. Van den Broek A. Intra-atomic charge and the structure of the atom // Nature. - 1913. - Vol. 92. - P. 476-478.
10. Горяга Г.И. Лекции по атомной физике. - 3-е изд. - М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983. - Ч. I.
11. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Справочник по физике для инженеров и студентов втузов. - 7-е изд. - М.: Наука, 1979.
12. Kuchling H. Physik. 17.-Auflage. - Leipzig: VEB Fachbuchverlag, 1985.
13. Лембра Ю.Я. Некоторые методические приемы при преподавании атомной физики VI // Методика преподавания физики в вузе. В помощь преподавателю IX. - Тарту: ТТУ, 1984. - С. 39-48.
14. Лембра Ю.Я. Некоторые методические приемы при преподавании атомной физики V // Методика преподавания физики в вузе. В помощь преподавателю VIII. - Тарту: ТТУ, 1983. - С. 54-73.
15. Лембра Ю.Я. Физические основы квантовой механики. - Тарту: ТТУ, 1983.
16. Атомные спектры: некоторые методические приемы и примеры / Сост. Ю.Я. Лембра. - Тарту: ТТУ, 1985.
17. Сивухин Д.В. Общий курс физики: Атомная и ядерная физика. - М.: Наука, 1986. - Ч. I.



## ОБ ИЗЛОЖЕНИИ ПРОБЛЕМЫ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА В КУРСЕ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

П.Л. Куки, А.А. Гаврилов, Э.К. Рейтер

Конкретные проблемы квантовой физики определяются видом потенциальной энергии  $U$ . Одной из важнейших является проблема линейного гармонического осциллятора, где потенциальная энергия представляет собой параболическую потенциальную яму. Задача об одномерном гармоническом осцилляторе находит свое применение при построении простейшей теории колебаний, которая имеет большое значение в самых разнообразных областях физики.

Несмотря на то, что решение уравнения Шредингера для осциллятора довольно сложное, вывод собственных значений осциллятора следует по возможности привести и в курсе общей физики. Это связано с тем, что полученный результат имеет много приложений в курсе общей физики и, кроме того, иллюстрирует все основные приемы решения более сложных квантовомеханических задач на собственные значения.

В настоящей статье предлагается следующая методика изложения этой темы.

### 1. Понятие осциллятора

Название "осциллятор" происходит от слова "осциллировать" – колебаться. Если колебания происходят по одному направлению, то говорят о линейном осцилляторе. Если, кроме того, колебания происходят по закону синуса или косинуса, то речь идет о линейном гармоническом осцилляторе.

### 2. Вид потенциальной энергии $U(x)$

Действие на тело упругой силы

$$F = - kx \quad (1)$$

приводит его в гармоническое колебательное движение. Здесь

$k$  — коэффициент жесткости,  $x$  — отклонение от положения равновесия.

В разделе "Физические основы механики" выводится потенциальная энергия осциллятора

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} \quad (2)$$

и доказывается, что круговая частота колебаний равняется

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (3)$$

где  $m$  — масса тела.

Из (2) видно, что потенциальная энергия осциллятора представляет собой параболическую потенциальную яму.

### 3. Важность проблемы осциллятора

В общем случае потенциальная энергия  $U(x)$  может иметь далеко не простой вид. Однако стабильные состояния образуются только в минимумах потенциальной энергии. В случае отсутствия больших флуктуаций система будет совершать движения вблизи своего положения устойчивого равновесия, и проблема определяется исключительно видом потенциальной энергии в окрестности минимума. Разложив  $U(x)$  в ряд Тейлора в окрестности точки минимума  $x_0$ , получим

$$U(x) = U(x_0) + \left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=x_0} (x-x_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=x_0} (x-x_0)^2 + \dots \quad (4)$$

Второй член в (4) выпадает, поскольку в точке минимума первая производная равна нулю:

$$U(x) = U(x_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=x_0} (x-x_0)^2 \quad (5)$$

Сместив начало отсчета потенциальной энергии в точку  $U(x_0)$  и координаты в точку  $x_0$  и обозначив  $k = \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=x_0}$ , найдем

$$U(x) = \frac{kx^2}{2}$$

Следовательно, система в окрестности точки минимума любой непрерывной потенциальной функции представляет собой осциллирующую систему. Например, атомы в кристалле совершают малые колебания вокруг точек равновесия — узлов кристаллической решетки.

### 4. Уравнение Шредингера для осциллятора

Подставляем (2) с учетом (3) в уравнение Шредингера

стационарных состояний:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = 0. \quad (6)$$

Для сильных учебных групп по физике и математике в ТПИ уравнение (6) решается по образцу [1, 2]. Уровни энергии осциллятора представляет в форме

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad (7)$$

где квантовое число  $n$  принимает значения

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

### 5. Нулевая энергия осциллятора

Согласно (7) квантовый гармонический осциллятор, даже когда он находится в состоянии с наименьшей энергией ( $n = 0$ ), обладает отличной от нуля энергией:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad (9)$$

т.е. совершает нулевые колебания.

Наименьшая возможная энергия классического осциллятора равна нулю. Данное различие квантового и классического осциллятора является следствием соотношения неопределенностей и это следует обязательно демонстрировать в курсе общей физики для всех технических специальностей.

Если классический осциллятор обладает нулевой энергией, то ее импульс  $p$  и координата  $x$  равны нулю. Этого не может быть в квантовой механике, так как согласно соотношению неопределенности Гейзенберга

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (10)$$

Полную энергию в основном состоянии можно получить, исходя из выражения

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2}. \quad (11)$$

Подставляя сюда из (10)  $\Delta x = \hbar/2\Delta p$  и минимизируя полученное выражение по  $\Delta p$ , получим  $E_{min} = E_0$ .

Таким образом, предложенная последовательность изложения проблемы осциллятора подчеркивает как нюансы решения самой проблемы, так и общую значимость проблемы осциллятора в квантовой физике.

## Л и т е р а т у р а

1. Семенченко В.К. Избранные главы теоретической физики. - М., 1966.
2. Ярив А. Введение в теорию и приложения квантовой механики. - М., 1984.

# ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ПРАВИЛ ОТБОРА ПО КВАЗИИМПУЛЬСУ В ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДАХ

О.И. Сильд

Правила отбора по квазиимпульсу управляют оптическими переходами в кристаллических системах, обладающих трансляционной симметрией.

Вероятность оптического перехода  $i \rightarrow f$  пропорциональна квадрату матричного элемента перехода:

$$\int \Psi_f^* H_{ij} \Psi_i d\vec{\tau}, \quad (1)$$

где  $\Psi_i$  и  $\Psi_f$  — волновые функции исходного и конечного квантовых состояний  $i$  и  $f$ , а  $H_{ij}$  — оператор взаимодействия со светом. Для однофотонных оптических переходов

$$H_{ij} \sim w(\vec{\pi}) e^{\pm i \vec{x} \vec{\pi}}, \quad (2)$$

где  $w(\vec{\pi})$  — периодическая функция, определенная атомной структурой кристалла и не меняющаяся при трансляции на вектор решетки  $\vec{\alpha}$ , т.е.  $w(\vec{\pi} + \vec{\alpha}) = w(\vec{\pi})$ ,  $\exp(\pm i \vec{x} \vec{\pi})$  — плоская волна поглощаемого (+) или излучаемого (-) фотона,  $\vec{x}$  — волновой вектор фотона [1].

Как электронные, так и колебательные собственные состояния трансляционно-симметричных систем характеризуются волновыми векторами  $\vec{k}$  и  $\vec{q}$  соответственно, определяющими координатные зависимости волновых функций собственных состояний через функции плоских волн:

$$\Psi_{эл} = u(\vec{\pi}) e^{i \vec{k} \vec{\tau}}, \quad \Psi_{кол} = v(\vec{\pi}) e^{i \vec{q} \vec{\tau}}, \quad (3)$$

где  $u(\vec{\pi})$  и  $v(\vec{\pi})$  — трансляционно-инвариантные функции, т.е.  $u(\vec{\pi} + \vec{\alpha}) = u(\vec{\pi})$  и  $v(\vec{\pi} + \vec{\alpha}) = v(\vec{\pi})$ .

Поэтому расчет матричного элемента (1), например, для электронного перехода, сводится к вычислению интеграла от произведения плоских волн:

$$\int e^{-i\vec{k}_f \vec{r}} e^{\pm i\vec{x} \vec{r}} e^{i\vec{k}_i \vec{r}} F(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (4)$$

где  $F(\vec{r})$  — произведение трансляционно-инвариантных функций типа  $u(\vec{r})$ ,  $v(\vec{r})$  и  $w(\vec{r})$ .

В частности, если функции плоских волн незначительно меняются в пределах одной кристаллической ячейки, можно в хорошем приближении (названном длинноволновым приближением) заменить в интеграле (4)  $F(\vec{r})$  ее средним значением по кристаллической ячейке. Останется интеграл от произведения синусоидальных плоских волн.

В общем случае, при трансляции на вектор решетки  $\vec{\alpha}$  интеграл (4) умножится на  $\exp[i(-\vec{k}_f + \vec{k}_i \pm \vec{x})\vec{\alpha}]$ , так как  $F(\vec{r} + \vec{\alpha}) = F(\vec{r})$ .

Отличный от нуля интеграл (тем самым и вероятность оптического перехода) должен быть инвариантом всех преобразований симметрии системы. Следовательно, при трансляции на вектор решетки интеграл (4) может умножаться на единицу, т.е. на  $\exp(i\vec{K}\vec{\alpha}) = 1$  ( $\vec{K}$  — вектор обратной решетки). Отсюда необходимое условие для отличной от нуля вероятности однофотонного электронного перехода

$$-\vec{k}_f + \vec{k}_i \pm \vec{x} = \vec{K}. \quad (5)$$

В оптических процессах можно ограничиться  $\vec{K} = 0$  (см. ниже).

Условие (5) часто записывают в следующем виде (см., например, [2, 3]):

$$\hbar \vec{k}_f - \hbar \vec{k}_i = \pm \hbar \vec{x}. \quad (5a)$$

Последнее равенство и называется правилом отбора для квазиимпульсов  $\hbar \vec{k}_i$  и  $\hbar \vec{k}_f$  электрона в исходном и конечном состояниях  $i$  и  $f$  оптического перехода  $i \rightarrow f$ .

В процессе рассеяния света участвуют падающий фотон с волновым вектором  $\vec{x}_1$  и рассеянный фотон с волновым вектором  $\vec{x}_2$ . Если при рассеянии квантовое состояние кристалла не меняется, правило отбора по квазиимпульсу следующее:

$$\hbar \vec{x}_2 - \hbar \vec{x}_1 = \hbar \vec{K}. \quad (6)$$

В оптической области опять ограничимся  $\vec{K} = 0$ .

Если в рассеянии участвует один фотон с волновым векто-

ром  $\vec{q}$ , в интеграл вероятности следует включить функцию  $\exp(\pm i\vec{q}\vec{r})$  уничтожаемого (+) или порождаемого (-) фонона, и правило отбора для комбинационного рассеяния с участием одного фонона имеет при  $\vec{K}=0$  вид:

$$\hbar \vec{x}_2 - \hbar \vec{x}_1 = \pm \hbar \vec{q}. \quad (7)$$

Таким образом, правило отбора по квазиимпульсу — это условие участия тех или иных плоских волн в оптическом переходе. Вероятность оптического перехода определяется взаимодействием плоских волн, причем мерой этого взаимодействия является произведение плоских волн типа (2) и (3).

Ниже на рисунках схематически изобразим пространственное распределение произведения плоских волн с целью наглядно выяснить условия, когда их взаимодействие отлично от нуля или равно нулю. Начнем со взаимодействия длинных плоских волн.

Пусть имеются две синусоидальные плоские волны A и B с длинами волн  $\lambda_A$  и  $\lambda_B$  и волновыми векторами  $\vec{k}_A$  и  $\vec{k}_B$  соответственно, т.е.  $|\vec{k}_A| = 2\pi/\lambda_A$  и  $|\vec{k}_B| = 2\pi/\lambda_B$ .

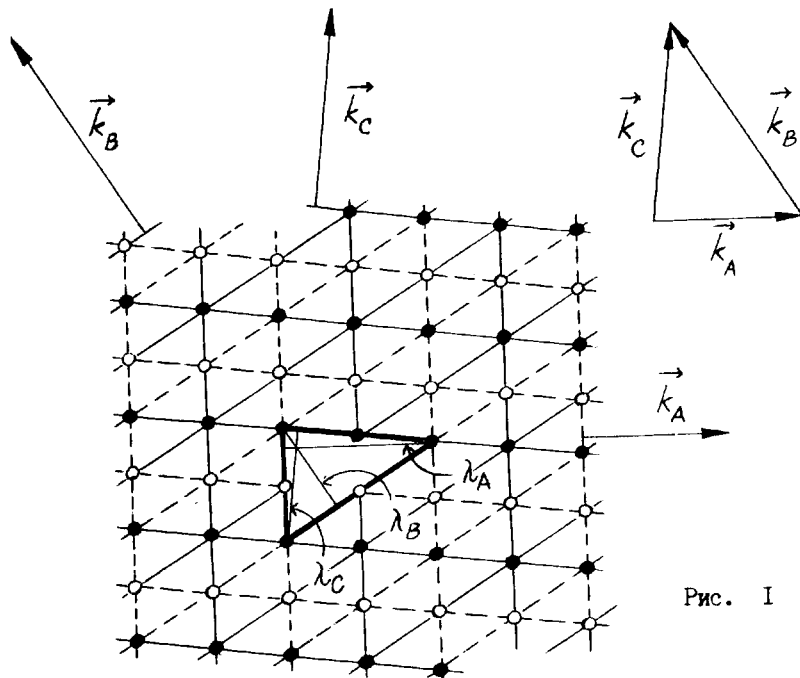


Рис. I

На рис. I изображены участки обеих (бесконечных!) плоских волн с векторами, лежащими в плоскости рисунка. Здесь сплошные линии изображают фронты максимальной (положительной) амплитуды, а пунктирные — фронты минимальной (отрицательной) амплитуды. Положительное произведение плоских волн обозначено черными пятнами, отрицательное — кружочками. В целом взаимодействие двух синусоидальных плоских волн как знакопеременная функция при усреднении по всему пространству равно нулю. Исключение составляет лишь частный случай  $\vec{k}_B = \vec{k}_A$ , когда мерой взаимодействия плоских волн является квадрат функции волны.

Дальше через черные пятна проведем сплошные линии, а через кружочки — пунктирные. Они соответствуют фронтам новой плоской волны С с длиной волны  $\lambda_C$  и волновым вектором  $\vec{k}_C$ . Ясно, что произведение трех плоских волн А, В и С уже отлично от нуля.

Как связан вектор  $\vec{k}_C$  с волновыми векторами  $\vec{k}_A$  и  $\vec{k}_B$ ? Прежде всего, раз фронты С-волны перпендикулярны плоскости рисунка, вектор  $\vec{k}_C$  лежит в плоскости рисунка, как  $\vec{k}_A$  и  $\vec{k}_B$ .

Дальше рассмотрим нарисованный на рис. I жирными линиями треугольник. Его высоты равны  $\lambda_A$ ,  $\lambda_B$  и  $\lambda_C$ . Поскольку  $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$ , его стороны пропорциональны  $|\vec{k}_A|$ ,  $|\vec{k}_B|$ ,  $|\vec{k}_C|$  и направлены перпендикулярно соответствующим волновым векторам. Следовательно, он подобен треугольнику волновых векторов на рис. I, откуда следует векторное соотношение:

$$\vec{k}_C = \vec{k}_A + \vec{k}_B. \quad (8)$$

Это соотношение — необходимое условие взаимодействия трех синусоидальных плоских волн, мерой которого является ненулевое пространственное распределение произведения волн. Только фиксированная этим соотношением взаимная ориентация волновых векторов обеспечит ненулевое интегральное взаимодействие волн А, В и С.

Легко получить аналогичное условие взаимодействия четырех плоских волн. Для этого достаточно представить себе плоскую волну С как волну произведения двух волн D и E с волновыми векторами  $\vec{k}_D$  и  $\vec{k}_E$  т.е.  $\vec{k}_C = \vec{k}_D + \vec{k}_E$ . Необходимым условием взаимодействия четырех плоских волн теперь является



векторное соотношение

$$\vec{k}_A + \vec{k}_B = \vec{k}_D + \vec{k}_E. \quad (9)$$

Так как при этом треугольники волновых векторов  $ABC$  и  $CDE$  могут пересекаться, то волновые векторы четырех взаимодействующих плоских волн  $A, B, D$  и  $E$  в общем случае, уже не компланарны.

Независимо от числа взаимодействующих волн суть векторных соотношений типа (8) и (9) та же — это условие отличного от нуля интегрального взаимодействия плоских волн, которое может быть понято без введения понятия квазиимпульса.

Как интерпретировать наглядно правила отбора по квазиимпульсу в случае  $\vec{K} = 0$ ?

Длина волны фотона оптической области гораздо больше размеров кристаллической ячейки, а волновые векторы оптических фотонов гораздо меньше векторов обратной решетки  $\vec{K}$ . Поэтому правила отбора оптической спектроскопии включают только  $\vec{K} = 0$ . Но в рентгеновской области эти векторы уже сравнимы, а длина волны — одного порядка с постоянной решетки. Здесь и следует учитывать процессы с  $\vec{K} \neq 0$ .

Рассмотрим, к примеру, процесс рассеяния коротковолновых фотонов без изменения электронно-колебательного состояния кристалла. Как и раньше, волновые векторы плоских волн падающего и рассеянного фотона обозначим через  $\vec{k}_1$  и  $\vec{k}_2$ . На рис. 2 изображено положительное и отрицательное произведение плоских волн пятнами и кружочками аналогично рис. I. Это произведение теперь уже значительно меняется в пределах кристаллической ячейки, т.е. длинноволновое приближение теории оптических процессов здесь не применимо. Поэтому и в интеграле вероятности (4) уже нельзя заменить атомно-структурную периодическую функцию  $F(\vec{r})$  ее средним значением по кристаллической ячейке.

Считаем фактор  $F(\vec{r})$  пропорциональным вероятности наличия атома в точке  $\vec{r}$ . Тогда вероятность процесса рассеяния определяется произведением амплитуд двух волн на вероятность наличия в данной точке.

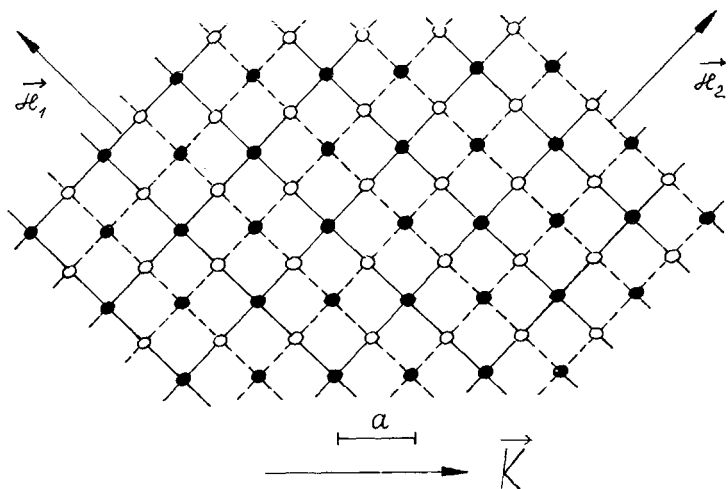


Рис. 2

Пусть векторы  $\vec{k}_1$  и  $\vec{k}_2$  выбраны на рис. 2 такими, что точки положительных произведений двух волн (пятна) совпадают с имеющимися атомами, а в точках отрицательных произведений волн (кружочки) атомов нет. В такой ситуации вероятность процесса рассеяния уже отлична от нуля, хотя  $\vec{k}_2 \neq \vec{k}_1$ .

Роль атомов в описанном процессе равносильна произведению двух плоских волн фотонов на третью плоскую волну, фронты которой — атомные плоскости. Если решетка простая кубическая с постоянным  $a$ ,  $\vec{k}_2 \perp \vec{k}_1$ ,  $|\vec{k}_2| = |\vec{k}_1| = 2\pi/a\sqrt{2}$ , тогда волновой вектор третьей волны оказывается именно вектором обратной решетки  $\vec{K}$  с длиной  $2\pi/a$ . Аналогично выводу формулы (8) получим здесь векторное соотношение

$$\vec{k}_2 - \vec{k}_1 = \vec{K}, \quad (10)$$

которое является необходимым условием взаимодействия двух фотонных волн в присутствии третьей — "атомной волны". Раз "атомная волна" стоячая, фотонные волны здесь также надо представить себе как стоячие.

В оптических переходах мы интересуемся условиями, когда отличны от нуля интегральные пространственные распределения произведений плоских волн, участвующих в опти-

ческом переходе. Эти условия – суть правила отбора по квази-импульсу.

Таковыми же произведениями плоских волн интересуются в нелинейной оптике, где результатом взаимодействия нескольких плоских волн (мера которого есть их произведение) является генерация нелинейных волн поляризации кристалла. Поэтому наш рис. 1 может служить картиной процесса генерации волны  $C$  в кристалле под действием волн  $A$  и  $B$ , а векторное соотношение (8) определяет волновой вектор  $\vec{k}_C$  генерируемой волны поляризации (см., например, учебник оптики [4]). В частности, взаимодействие плоской волны с самой собой генерирует т.н. вторую гармонику с волновым вектором  $\vec{k}_C = 2\vec{k}_A$  и, следовательно, с удвоенной частотой.

#### Л и т е р а т у р а

1. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. – М.: Изд-во иностр. лит., 1956.
2. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. – М.: Мир, 1974.
3. Панков Ж. Оптические процессы в полупроводниках. – М.: Мир, 1966.
4. Матвеев А.Н. Оптика. – М.: Высшая школа, 1985.

## ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ. ФИЗИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ И КЛАССИФИКАЦИЯ

У.Х. Мельдер

В традиционных курсах квантовой механики для физиков ограничиваются рассмотрением простейших систем из ядер и электронов (атомы водорода и гелия, молекула водорода), а вопрос о природе химической связи относят к курсу химии. Тем не менее физики не менее химиков нуждаются в определенной ясности в этой области. Подобные вопросы возникают в курсах молекулярной физики и спектроскопии, строения вещества, физики твердого тела и др. Надо отметить, что по поводу классификации химических связей отсутствует единогласие и в химической литературе. Авторы исходят из различных моделей классической химии, иногда трудно сопоставимых с современными квантово-химическими представлениями. Учитывая огромное разнообразие химических соединений, не удивительно, что для описания их строения и объяснения их устойчивости химиками введено множество различных моделей и определений химических связей. Автор настоящей статьи ставит целью обобщить имеющиеся взгляды с последовательным привлечением квантовой механики.

Химическая частица определяется в данном контексте как выделенная в микросистеме подсистема (элемент структуры), внутри которой взаимодействия ядер и электронов значительно превышают внешние. Таковыми являются свободные атомы, молекулы, молекулярные ионы, радикалы, комплексы, кристаллы и т.д. Как физическая модель она оправдана наиболее четко в случае частиц в разреженных газах. В экстремальных физических ситуациях (сильные электрические и магнитные поля, высокие температуры) понятие химической частицы теряет смысл (например, в плазме). В случае сильных взаимодействий со средой невозможно говорить о молекуле (примеры из биологии), кристаллы и тем более ме-

талл целиком составляют химическую частицу. Из сказанного следует также, что модель классической химии — атомы в составе молекулы, приемлема лишь в случае слабых взаимодействий между атомами.

В классической химии принято считать, что атомы взаимодействуют попарно. Те из парных взаимодействий, которые в основном определяют устойчивость молекулы, называются химическими связями. Для объяснения того факта, что одна и та же пара атомов в составе различных молекул образует химические связи различной прочности, введено дополнительно понятие кратности связи. Общее количество химических связей, образуемых атомом в данной молекуле с учетом кратностей, называется валентностью атома. Так как это определение не отличается строгостью, в настоящее время теоретическая химия часто не вводит понятия валентности [1].

Наиболее общее определение химической связи — это взаимодействие двух или более атомов (фрагментов), в результате которого возникает устойчивая система, химическая частица. В двухатомных молекулах энергия химической связи совпадает с энергией диссоциации молекулы на атомы, но в случае многоатомной молекулы ситуация осложняется. Непосредственному измерению поддается лишь изменение свободной энергии при образовании молекулы, а установить распределение полной энергии по отдельным химическим связям представляется невозможным. Считая химические связи единственным взаимодействием между атомами в химической частице, свободную энергию молекулы делят на приблизительно аддитивные составляющие. Таким образом, на базе статистической обработки экспериментальных данных получены т.н. средние энергии химических связей.

В квантовой механике измеряемые значения физических величин вычисляются как соответствующие квантово-механические средние значения. Необходимого для такого расчета оператора энергии химической связи для многоатомной молекулы в вышеприведенном определении составить не удастся и, очевидно, отсутствует возможность непосредственного расчета этой величины [2]. Квантово-химические задачи расчета электронного строения сводятся к решению электронного уравнения Шредингера, как правило, в адиабатическом и одноэлектронном приближениях. При

этом одноэлектронные волновые функции для молекулы — молекулярные орбитали (МО) — образуют в виде линейных комбинаций одноэлектронных волновых функций атомов — атомных орбиталей (АО). Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО) допускает подходящую для химических проблем интерпретацию результатов расчета.\*

Так как в гамильтониан молекулы входят только операторы энергии взаимодействия точечных зарядов, химическая связь является результатом кулоновских взаимодействий электронов и ядер. Тем не менее любые модели классической физики не в состоянии описать природу химической связи. Эта задача решается квантовой механикой, позволяющей вычислить распределение электронной плотности в пространстве. В некоторых работах возникновение химической связи относят к неклассическому члену в выражении полной энергии молекулы, к т.н. обменной энергии, ссылаясь на известный принцип тождественности микрочастиц. Необходимо отметить, что указанный член в выражении энергии молекулы водорода возникает в силу использования волновой функции в приближении ЛКАО и не возникает вообще в случае точной волновой функции. При решении задач одноэлектронных систем (например, молекулярный ион  $\text{H}_2^+$ ) отпадает вопрос о тождественности электронов, и приведенное объяснение становится неприемлемым. Нет необходимости ввода обменных сил (энергий) для обоснования химической связи.

Основным признаком химической связи, позволяющим одновременно отличить ее от остальных видов взаимодействий, является существенное перераспределение электронных оболочек атомов в области химической связи. При образовании химической связи электронная плотность в области между ядрами увеличивается (иногда называется зарядом перекрывания) по сравнению с суммой электронных плотностей изолированных атомов или фрагментов на расстоянии длины связи между ними. В определенном приближении можно образование химической связи представить как кулоновское притяжение ядер к объемному заряду перекрывания в области связи. В двухатомной молекуле

\* Указанные приближения при решении уравнения Шредингера известны также из теории твердого тела.

заряд перекрывания притягивает ядра, в то время как влияние электронного заряда за ядрами, складываясь к межядерному отталкиванию, действует в обратном направлении. Электронный заряд перераспределяется таким образом, чтобы на расстоянии длины химической связи (равновесное состояние) указанные силы уравнивались. Очевидно, заряд перекрывания при этом должен иметь оптимальную величину для обеспечения минимума полной энергии молекулы.

На основе квантово-химического расчета молекулы водорода Руденберг [3] провел детальный анализ различных вкладов в энергию химической связи. Не вдаваясь в детали этого анализа, цитируем здесь лишь общие результаты работы. Оказывается, что при образовании молекулы водорода из двух атомов водорода отрицательный вклад энергии притяжения электронов к двум ядрам возрастает больше, чем положительные вклады прироста кинетической энергии электронов, отталкивания электронов и отталкивания ядер вместе взятые. При этом строго выполняется теорема вириала (в случае кулоновского потенциала — средняя кинетическая энергия равна полной энергии системы с обратным знаком). Более детальный анализ приводит к выводу, что такой баланс энергий возникает в результате взаимной конкуренции двух процессов: перекрыванием атомных орбиталей атомов и контракцией их при образовании молекулы.

При приближении атомов друг к другу происходит перекрывание атомных орбиталей, что приводит к образованию общей для молекулы молекулярной орбитали. Переход электрона от атомной орбитали на молекулярную равносильно увеличению размеров потенциального ящика для данного электрона. По известному принципу неопределенностей Гейзенберга ( $\Delta x \Delta p \approx \hbar$ ) прирост размеров потенциального ящика приводит к спаду кинетической энергии электрона  $\Delta T < 0$  и к одновременному приросту потенциальной энергии  $\Delta U > 0$ . Эти изменения энергии не соответствуют требованиям теоремы вириала.

Процесс контракции (сжатия) атомных орбиталей при образовании молекулы ведет к существенным изменениям компонентов полной энергии. В расчете молекулы это проявляется в виде роста варьируемой для получения хорошей полной энергии системы орбитальной экспоненты атомных орбиталей. Такая проце-

дура варьирования экспонент равносильна учету межэлектронного взаимодействия, а сама экспонента допускает интерпретацию эффективного заряда ядра в молекуле. В расчетах молекулы водорода эффективный заряд ядра возрастает до 1,20 а.е. В результате максимум радиальной плотности электрона смещается ближе к ядру, и кинетическая энергия его возрастает  $\Delta T > 0$ , а потенциальная соответственно убывает  $\Delta U < 0$ . Надо отметить, что эффект сжатия атомных орбиталей в отдельности невыгодный (полная энергия растет,  $\Delta E > 0$ ), но если прирост кинетической энергии компенсируется эффектом перекрывания атомных орбиталей, то именно эффект контракции определяет понижение потенциальной энергии.

Во многих молекулах (галогиды, спирты, эфиры, сульфиды, амины и т.д.) существуют валентные электроны, не участвующие в образовании химических связей (т.н. неподеленные пары электронов) и заселяющие несвязывающие молекулярные орбитали. Такие электроны остаются у исходных атомов, а соответствующие МО образуются без значительного перекрывания атомных орбиталей соседних атомов. Основной эффект, определяющий энергию таких орбиталей, — контракция. Следовательно, для таких электронов  $\Delta E > 0$  и они меньше стабилизированы по сравнению со связывающими электронами. Действительно, из фотоэлектронных спектров таких молекул известно, что именно несвязывающие электроны имеют наинизшие энергии ионизации.

Хотя в принципе квантовая химия не содержит понятия химической связи, все же расчеты двухатомных молекул позволяют проводить естественную классификацию химических связей, исходя из электронной структуры молекулы. В дальнейшем будем различать валентные и невалентные химические связи. Однако следует отметить, что принципиального различия между валентными и невалентными связями нет. Приведенная классификация является в определенной мере условной и вводится исключительно в интересах более глубокого понимания укоренившейся в химии системы классификации химических связей по механизму возникновения или генеалогической классификации.

Полные антисимметричные многоэлектронные волновые функции (спинорбитали) образуют в виде детерминанта Слэтера, элементами которого являются одноэлектронные волновые функции,



в случае молекулы молекулярные орбитали. Распределение заряда в молекуле описывается именно многоэлектронной волновой функцией. Но значение детерминанта с точностью до постоянной не меняется при образовании линейных комбинаций от его столбцов или рядов. Значит и молекулярные орбитали не определены однозначно – все линейные комбинации МО описывают одно и то же распределение заряда в молекуле. Если среди возможных комбинаций МО можно выделить такую, которая с заданной точностью локализована на паре атомов, то связь между этими атомами называется валентной. Согласно принципу Паули, на каждую орбиталь можно поместить максимально два электрона с противоположными спинами. Тем самым электронным парам отведена существенная роль в возникновении валентных связей.

Следует иметь в виду, что с энергетической точки зрения спаривание спинов электронов существенной роли в химической связи не играет. Сказанное подтверждается следующими фактами. Во-первых, решение уравнения Шредингера, не учитывающего спин электронов, описывает качественно правильно устойчивость молекул и энергий химических связей. Во-вторых, энергия взаимодействия спинов электронов небольшая и, к тому же, для того, чтобы поместить два электрона на одну орбиталь, приходится затратить энергию (ср. правило Хунда). Наконец, стабильным является также одноэлектронный ион  $H_2^+$ .

В классической химии, в рамках генеалогической классификации, валентные связи называют ковалентными (гомеополярными), если для образования связи каждый из атомов отдал по одному неспаренному электрону. При образовании химической связи между различными атомами энергия будет ниже, если связывающая пара электронов смещена в сторону более электроотрицательного атома – возникает полярная ковалентная (гетерополярная) связь. В двухатомных молекулах полярность связи выражается дипольным моментом молекулы, а в многоатомных молекулах для характеристики полярности связей приходится пользоваться постулатом аддитивного разложения дипольного момента молекулы по химическим связям. В предельном случае, если энергия ионизации одного атома сравнительно низкая, а сродство к электрону второго высокое, электрон переходит от первого атома ко второму, и осуществляется ионная связь. Воз-

нившие таким образом ионы притягиваются электростатическими силами. Так как это взаимодействие не зависит от направления, при помощи ионной связи образуются структуры, строение которых определяют условия пространственной упаковки (как в ионных кристаллах). С точки зрения квантовой химии все эти разновидности валентных связей описываются просто различными коэффициентами в разложении МО по АО. Квадрат коэффициента интерпретируется как вероятность нахождения электрона вблизи данного атома. В отдельных случаях для описания распределения заряда в связи вводят разложение химической связи на компоненты: одна или несколько ковалентных и одна ионная связь. Такая комбинация называется семиполярной связью. Простейшим примером семиполярной связи может служить молекула  $\text{CO} \equiv \text{C}^+ \text{O}^-$ .

В отдельный класс выделяют химические связи, в которых оба связывающих электрона принадлежат одному из атомов, образуя связь. К таким связям относятся донорно-акцепторная и водородная связь. В химической литературе эти связи часто приписывают к координационным. О координационной связи принято говорить, если координационное число превышает максимальную спиновую валентность центрального атома в комплексе. При этом под координационным числом в комплексном соединении понимают количество соседей (лигандов) в окружении центрального атома (образователя комплекса), а спиновая валентность — это число неспаренных электронов в атоме, способных к спариванию в ковалентных связях. Такие связи возникают, если у донора имеется орбиталь, занятая неподеленной парой электронов, и у акцептора вакантная орбиталь более низкой энергии. Водородные связи характерны для жидкостей, где атом водорода с координационным числом два образует водородные мостики между атомами, создавая ассоциаты. Знаменитая двойная спираль ДНК держится за счет водородных связей.

Все вышеприведенные виды химических связей имеют различный механизм возникновения, но образовавшись, являются валентными связями.

К невалентным связям относим химические связи в соединениях, для которых характерна значительная делокализация электронного распределения, описываемая только многоцентро-

выми орбиталями. Для таких систем детерминант Слэтера не допускает комбинаций МО, заметно локализованных на парах атомов. Следовательно, невозможно отличить отдельные химические связи между атомами и тем самым невозможно делить физические величины аддитивным образом по связям. Сюда относятся связи в ароматных циклах (например, бензол), в сопряженных цепях (как полиены), связи в комплексах металлов (типа ферроцен), электронодефицитные соединения (диборан) и др. Предельным случаем делокализации электронной плотности является металлическая связь, которую образуют общие всем положительным ионам металла электроны. Невалентные связи реализуются также в открытых недавно "молекулах в клетке". Например, кристаллогидраты природного газа (клатраты), протон или ион щелочного металла внутри макроциклической молекулы (криптаты) и др.

Кроме того, существуют химические частицы, устойчивость которых обеспечивается силами иной природы. Типичным примером являются универсальные взаимодействия в конденсированных средах (диполь-диполь, диполь-индуцированный диполь, дисперсионные силы), а также топологические связи, введенные для объяснения стереохимии некоторых необычных химических соединений. Например, в соединениях, молекула которых образуется как одно целое из двух циклов, продетых один через другой (катенаны). Оказалось, что катенановые ДНК довольно распространены в природе.

Несмотря на то, что энергии химических связей варьируются в широком диапазоне (от 10 кДж/моль для водородной связи до 1000 кДж/моль для тройной  $C\equiv C$  связи), приведенный квантово-химический признак позволяет в определенной мере отличить химические связи от взаимодействий иной природы.

### Л и т е р а т у р а

1. Химия / Под ред. Г.Д. Вовченко. - М.: Мир, 1972. - 680 с.
2. Татевский В.М. Строение молекул. - М.: Химия, 1977. - 512 с.
3. Рюденберг К. Физическая природа химической связи. - М.: Мир, 1964.
4. Пиментел Г., Спратли Р. Как квантовая механика объясняет химическую связь. - М.: Мир, 1973. - 331 с.

## О ВЕКТОРНОЙ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОНА СО СПИНОМ\*

О.В. Сакс

Модели микрообъектов, как, например, модель атома Бора и его модификации, модель электрона Гаудсмита-Уленбека и др. [1], имеют главным образом историческое значение. Однако наглядность таких моделей делает их в некоторых случаях полезным дидактическим средством, несмотря на то, что они несовершенны и не могут претендовать на значение фундаментальных теорий, конкурентоспособных с современной квантовой механикой. Наглядная модель микрообъекта может представлять интерес в том случае, когда она каким-то образом содействует более глубокому пониманию микрообъекта [2].

До сих пор считалось, что спин электрона не может быть описан классическим способом с помощью трехмерного вектора. В квантовой механике для описания спиновых свойств электрона применяется оператор спина в виде матриц Паули [3].

В данной работе рассматривается векторная модель спина электрона и связанные с ней проблемы.

Экспериментальное разделение электронов по спиновому состоянию с помощью фильтра Штерна-Герлаха [1, 4] или любого другого известного магнитного устройства невозможно из-за силы Лоренца, под действием которой электроны отклоняются в одну сторону, независимо от спина.

Фильтр Штерна-Герлаха применим для разделения нейтральных частиц с различными спинами. Например, пучок неполяризованных атомов водорода в основном состоянии  $^2S_{1/2}$  пропущенный через фильтр Штерна-Герлаха, разделяется на два пучка полностью поляризованных атомов. Это происходит в результате взаимодействия магнитных полей фильтра и электронов, входящих в состав атомов водорода. Ориентация же магнитного поля

---

\* Публикуется в порядке дискуссии.

данного атома определяется практически ориентацией спина электрона (магнитным полем ядра можно пренебречь). Поэтому действие фильтра на пучок атомов водорода можно рассматривать как действие на неполяризованные электроны, заряд которых нейтрализован зарядом протонов.

Ниже, говоря о прохождении пучка электронов через фильтр Штерна-Герлаха, автор имеет в виду пучок "нейтрализованных" электронов.

Допустим, что количество неполяризованных электронов, попадающих на вход фильтра, равно  $N$ . Тогда на выходе фильтра в каждом поляризованном пучке получают количество электронов, равное  $(1/2)N$ .

Опишем ориентацию каждого электрона в пучках с помощью трехмерного вектора спина  $\vec{s}$ . Подобный подход чужд для квантовой механики, так как принципиально отсутствует эксперимент, в котором можно определить ориентацию вектора спина. Согласно квантовой механике, физический смысл имеет средний вектор спина для пучка электронов  $\langle \vec{s} \rangle$ , т. е. статистически среднее значение вектора, которое может определяться в эксперименте. Следовательно, предлагаемый нами подход к проблеме описания ориентации векторов спина является чисто классическим. Тем не менее он приводит к тому же численному результату, что и квантовая механика.

В таком случае согласно классическим представлениям неполяризованный пучок электронов может быть описан с помощью  $N$  векторов  $\vec{s}_i$ , где  $i = 1, 2, \dots, N$ . Хотя электроны в пучке находятся на разных расстояниях друг от друга, можно мысленно сдвинуть все начала векторов  $\vec{s}_i$  в одну точку  $O$ , расположенную на оси пучка. Тогда векторы  $\vec{s}_i$  оказываются расположенными радиально в сфере с радиусом  $|\vec{s}|$ . При этом они равномерно распределены в телесном угле  $4\pi$ . Для поляризованного пучка электронов получим аналогичным образом набор векторов, распределенных равномерно-радиально в полусфере.

Сумму всех векторов  $\vec{s}_i$  можно представить через составляющие в виде:

$$\sum_{i=1}^N \vec{s}_i = s \sum_{i=1}^N (\cos \varphi_i \vec{e} + \sin \varphi_i \vec{j} + \cos \theta_i \vec{k}), \quad (I)$$

где  $\vec{e}, \vec{j}, \vec{k}$  — единичные векторы декартовых координат

$x, y, z, \varphi$  и  $\theta$  — сферические (полярные) координаты;  $\lambda = |\vec{s}|$ .

Сумма (I) для неполяризованного пучка будет равной нулю, а для поляризованных пучков — отличной от нуля.

Вычислим средний вектор  $\langle \vec{s} \rangle$ , характеризующий пучок поляризованных электронов, число которых должно быть  $N_1 = N/2$ . Допустим, что магнитное поле ориентировано в направлении оси  $z$ . Благодаря равномерно-радиальному распределению проекций векторов  $\vec{s}_i$  на плоскость  $xy$  две суммы из представления (I) оказываются равными нулю:

$$\sum_{i=1}^{N_1} \cos \varphi_i \cdot \vec{r} = 0; \quad \sum_{i=1}^{N_1} \sin \varphi_i \cdot \vec{r} = 0.$$

Для среднего вектора  $\langle \vec{s} \rangle$  получим выражение:

$$\langle \vec{s} \rangle = \frac{\lambda}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} \cos \theta_i \cdot \vec{k}. \quad (2)$$

В случае большого количества электронов  $N_1$  суммирование в формуле (2) можно заменить на интегрирование в телесном угле  $2\pi$ . Для этого обозначим через  $dN_1$  количество электронов, векторы спина которых образуют относительно оси  $z$  углы от  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ , через  $n$  — плотность конечных точек векторов  $\vec{s}_i$  на поверхности полусферы, а через  $d\sigma$  — элемент площади. Тогда получим:

$$dN_1 = n d\sigma = \frac{N_1}{2\pi r^2} \cdot 2\pi r^2 \sin \theta d\theta = N_1 \sin \theta d\theta.$$

Выражение абсолютного значения вектора  $\langle \vec{s} \rangle$  имеем в виде:

$$|\langle \vec{s} \rangle| = \frac{\lambda}{N_1 (2\pi)} \int_0^{\pi/2} \cos \theta \cdot dN_1 = \lambda \int_0^{\pi/2} \sin \theta \cos \theta d\theta = \lambda/2.$$

Для двух пучков поляризованных электронов, выделенных из одного неполяризованного пучка, получим следующие средние векторы:

$$\langle \vec{s} \rangle_+ = \frac{\lambda}{2} \vec{k} \quad \text{и} \quad \langle \vec{s} \rangle_- = -\frac{\lambda}{2} \vec{k}. \quad (3)$$

Согласно квантовой механике, средние векторы состояния двух поляризованных пучков электронов можно записать в следующем виде:

$$\langle \vec{s} \rangle_+ = \frac{1}{2} \hbar \vec{k} \quad \text{и} \quad \langle \vec{s} \rangle_- = -\frac{1}{2} \hbar \vec{k}. \quad (4)$$

Сравнивая формулы (3) и (4), следует полагать

$$\lambda = \hbar. \quad (5)$$

Таким образом, для того, чтобы согласовать векторную модель

электрона с результатами эксперимента, а также с квантовой механикой, следует принять модель собственного момента импульса равным  $\hbar$ .

Предложенная векторная модель электрона не обеспечивает полного согласия с квантовой механикой. По мнению автора, достаточно потребовать, чтобы модель микрообъекта была бы согласована с квантовой механикой по тем пунктам, которые подчиняются экспериментальной проверке. Объясним данное утверждение на примере.

Матрицы момента импульса для спина  $\frac{\hbar}{2}$  называемые матрицами Паули, имеют вид:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Из них следует:

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad (6)$$

$$\sqrt{S^2} = \hbar \sqrt{3}/2$$

Сравнивая (5) и (6), видим, что по векторной модели, предложенной автором, момент импульса электрона несколько больше того значения, которое следует из матриц Паули:

$$\Delta = 1,1547 \sqrt{S^2}$$

Однако измерение абсолютного значения собственного момента импульса одного электрона осуществить невозможно. Опытным путем может быть определено только среднее значение проекции этого импульса для ансамбля электронов, а здесь и векторная модель, и квантовая механика дают значение  $\hbar/2$ . Поэтому вопрос о правильности значения спина - по (5) или по (6) - лишен смысла.

В качестве примера практического применения векторной модели рассмотрим задачу о прохождении электронов через два последовательных фильтра Штерна-Герлаха, магнитные векторы которых образуют между собой угол  $\xi$  (рис. 1).

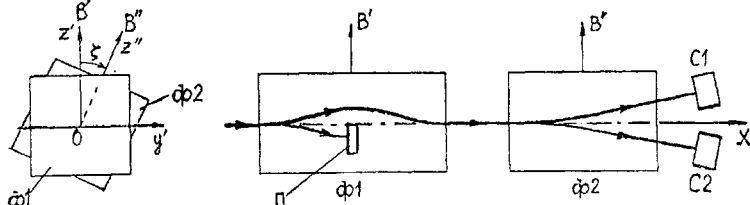


Рис. 1. Схема прохождения электронов через фильтры Штерна-Герлаха.

Процесс прохождения электронов через фильтры можно представить себе следующим образом.

Допустим, что первый фильтр  $\Phi 1$  пропускает электроны, векторы спина которых ориентированы в верхней полусфере. Электроны со спином, направленным вниз, загораживаются с помощью пластинки П.

При прохождении фильтра все электроны прецессируют под действием магнитного поля  $\vec{B}'$ . Это явление аналогично прецессии микроскопического гироскопа, находящегося в силовом поле.

Векторы спина описывают конусы. При этом каждый вектор сохраняет свой первоначальный угол относительно направления магнитного поля. Обозначим этот угол через  $\theta$ . Несмотря на разные углы  $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ , все электроны, имеющие одинаковое спиновое состояние, при прохождении любой точки постоянного магнитного поля прецессируют в данной точке с одинаковой частотой и в одном направлении.

При прохождении второго фильтра  $\Phi 2$ , наклоненного под углом  $\xi$  к направлению  $\vec{B}'$ , электроны разделяются в зависимости от угла вектора спина  $\theta$ . На выходе фильтра  $\Phi 2$  они регистрируются с помощью счетчиков С1 и С2.

Электроны, векторы которых образуют угол  $\theta + \xi > \frac{\pi}{2}$ , имеют проекцию вектора спина, направленного против магнитного поля, т.е. скалярное произведение  $\vec{s} \cdot \vec{B}' < 0$ . В фильтре  $\Phi 2$  такие электроны прецессируют в обратном направлении, отклоняются "вниз" и попадают в счетчик С2. Остальные электроны, для которых выполняется условие  $\theta + \xi < \frac{\pi}{2}$ , направляются в счетчик С1.

Вычислим вероятности срабатывания счетчиков С1 и С2. Для этого рассмотрим подробнее, каким образом связаны между собой проекция спина и вероятности прохождения фильтра "вверх" или "вниз".

Так как все направления вектора  $\vec{s}$  в верхней полусфере равновероятны, то среднее значение проекций вектора  $\vec{s}$  на направление магнитного поля  $\vec{B}'$  получим путем суммирования всех проекций, умноженных на соответствующие вероятности пространственного распределения вектора спина, т.е.

$$\langle \vec{s} \cdot \vec{B}' \rangle = \int_{(2\pi)} s \cos \theta \, d\omega,$$



где  $k \cos \theta$  — проекция вектора  $\vec{s}$  под углом  $\theta$ ;  $dw = f(w) d\theta$  — элемент вероятности того, что данный вектор  $\vec{s}$  образует угол от  $\theta$  до  $\theta + d\theta$ ;  $f(w)$  — плотность вероятности;  $d\sigma$  — элемент поверхности.

$$f(w) = \frac{1}{2\pi k^2}; \quad d\sigma = 2\pi k \sin \theta d\theta$$

Таким образом, получим среднее значение проекции вектора спина, аналогичное формуле (3):

$$\langle \vec{s}' \rangle = k \int \sin \theta \cos \theta d\theta = k/2.$$

В последнем выражении  $k/2$  можно рассматривать как среднее значение проекции с вероятностью  $w = 1$  потому, что через  $\Phi I$  проходит каждый электрон, характеризуемый углом вектора  $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ , т.е.

$$|\langle \vec{s}' \rangle| = \frac{1}{2} k w. \quad (7)$$

При прохождении второго фильтра  $\Phi 2$ , наклоненного на угол  $\xi$ , те же электроны разделяются с вероятностями  $w_1$  и  $w_2$  так, что  $w_1 + w_2 = 1$ . Предполагаем, что сумма проекций среднего вектора спина на направление магнитного поля  $\vec{B}''$  сохраняет постоянное значение  $k/2$ :

$$|\langle \vec{s}'' \rangle_+| + |\langle \vec{s}'' \rangle_-| = \frac{1}{2} k w_1 + \frac{1}{2} k w_2 = \frac{k}{2}, \quad (8)$$

где  $|\langle \vec{s}'' \rangle_+|$  и  $|\langle \vec{s}'' \rangle_-|$  — положительная и отрицательная составляющие проекции среднего вектора спина на направление  $\vec{B}''$ .

Для вычисления интегралов выберем на сфере с радиусом  $|\vec{s}| = k$  элемент площади  $d\sigma$  с координатными углами  $\varphi$  и  $\xi$ , как показано на рис. 2:

$$d\sigma = k d\xi k \sin \varphi d\varphi$$

Теперь элемент вероятности  $dw$  выражается:

$$dw = f(w) d\sigma = \frac{1}{2\pi k^2} k^2 \sin \varphi d\varphi d\xi = \frac{1}{2\pi} \sin \varphi d\varphi d\xi$$

Если вектор  $\vec{s}'$  направлен в точку с координатами  $(\varphi, \xi)$ , то длина проекции этого вектора на направление  $\vec{B}''$  — обозначим через  $s_z$  — равна

$$s_z = k \sin \varphi \sin \xi.$$

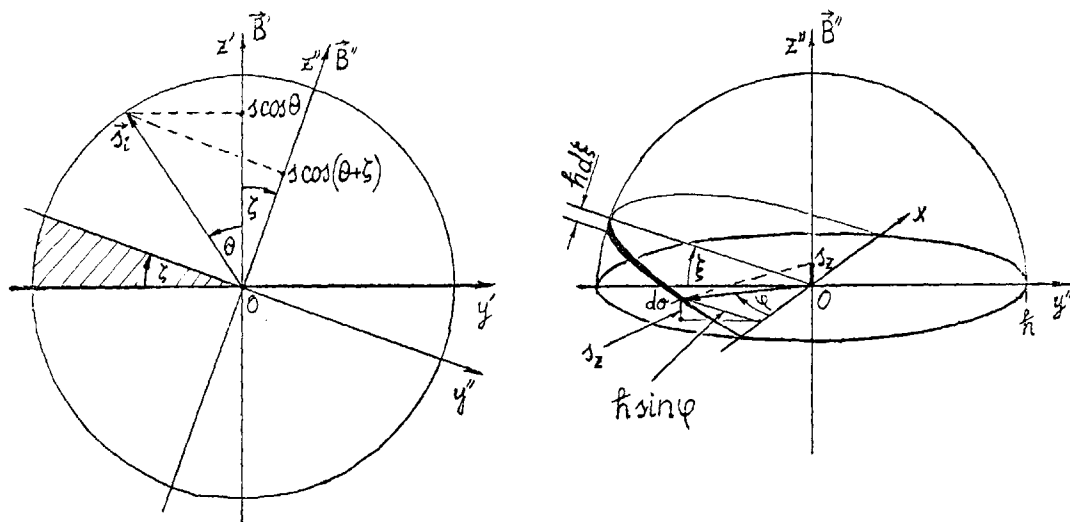


Рис.2. К вычислению вероятностей  $w_1$  и  $w_2$ .

Составляющие проекции среднего вектора выражаются следующим образом:

$$|\langle \vec{s}^+ \rangle| = \int_0^{\pi-f} s_z d\omega = \frac{2k}{2\pi} \int_0^{\pi-f} \int_0^{2\pi} \sin f \sin^2 \vartheta d\vartheta d\varphi = \frac{k}{\pi} \frac{\pi}{4} \int_0^{\pi-f} \sin f df = \quad (9)$$

$$= \frac{1}{2} k \cos^2 \frac{f}{2}.$$

Аналогичное вычисление для отрицательной проекции даст:

$$|\langle \vec{s}^- \rangle| = \frac{1}{2} k \sin^2 \frac{f}{2} \quad (10)$$

Согласно соотношению (8), из формул (9) и (10) получим вероятности

$$w_1 = \cos^2 \frac{f}{2} \quad \text{и} \quad w_2 = \sin^2 \frac{f}{2}.$$

Полученные результаты полностью согласуются с вероятностями, вычисляемыми с применением математического аппарата современной квантовой механики [3].

Предварительные рассуждения позволяют надеяться, что векторная модель собственного момента импульса применима для всех микрообъектов с ненулевой массой. По мнению автора, "кирпичиком" собственного момента импульса является  $|\vec{s}| = k$ , проекцией спина  $\pm \frac{k}{2}$  и в то же время вектором  $|\vec{s}| = k$  обладают только элементарные микрообъекты (электроны, позитроны, протоны, нейтроны и др.), а проекцией, равной нулю и  $\pm(k, \frac{3}{2}k, 2k \dots)$  — микрообъекты, состоящие из двух или нескольких элементарных частиц (атомные ядра и др.).

## Л и т е р а т у р а

1. Джеммер М. Эволюция понятий квантовой механики: Пер. с англ. / Под ред. Л.И. Пономарева. - М.: Наука, 1985. - 384 с.
2. Сакс О.В. Об одной воображаемой модели атома гелия // Методика преподавания физики в вузе. В помощь преподавателю XI. - Тарту: ТГУ, 1986. - С. 40-51.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика: Нерелятивистская теория. - 3-е изд. - М.: Наука, 1974.
4. Фейнман Р. и др. Фейнманские лекции по физике. Квантовая механика I: Пер. с англ. / Под ред. Я.А. Смородинского. - М.: Мир, 1966. - Вып. 8. - 272 с.

## ОБ ИСТОРИИ РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ В ТАРТУСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

А.Я. Паз, А.А. Хаав

В статье [1] приведены данные, показывающие, как в середине двадцатых годов начиналась и развивалась научная работа по рентгенографии кристаллов в Тартуском университете. Основоположником этого направления исследований был Х. Перлитц, воспитанник Петербургского университета.

В 1921 г. Х. Перлитц был выбран доцентом кафедры теоретической физики Тартуского университета. Представляет интерес выяснить, как связана научная деятельность Х. Перлитца с его преподавательской работой и как развивалась экспериментальная база рентгеновских исследований. Эти вопросы рассматриваются в настоящем сообщении.

По-видимому, в первые годы работы в университете у Х. Перлитца отсутствовало четкое направление научной работы. В 1924 г. он посетил во Франции 16 физических лабораторий. Уже в 1926 году была опубликована его первая статья [2], связанная со структурой чистых металлов. Кроме того, в весеннем семестре того же года он читал курс лекций "Структура кристаллов на основе рентгенографических данных" [3]\*. Это показывает, что он начал заниматься проблемами структурных исследований в 1925 г., т.е. после возвращения из Франции. В это же время начинается создание экспериментальной базы для рентгеновских исследований. В 1926 г. университет заказал, а в 1927 г. прибыл рентгеновский спектрограф конструкции Мюллера вместе с рентгеновской трубкой. Спектрограф позволил провести

---

\* Все данные о преподавательской работе Х. Перлитца получены из указанного в [3] издания (Программа лекций Тартуского университета), последний выпуск которого относится к 1940 г.

кроме спектральных исследований в диапазоне длин волн рентгеновского излучения и структурных исследований, т.е. получать рентгенограммы кристаллов.

После двухлетней паузы Х. Перлитц читал в весеннем семестре 1929 г. курс лекций "Структура кристаллов" в объеме 4 часа в неделю. Однако теперь лекции дополнялись решением задач (2 часа в неделю). В таком объеме (6 часов в неделю) этот курс он читал до 1939 г., хотя название курса изменялось. Например, в 1930 г. курс назывался "Интерференция рентгеновского излучения и структура кристаллов", в 1931 году - "Кристаллография и рентгеновское излучение" и т.д.

В 1939 г., в рамках курса теоретической физики, Х. Перлитц читал курс "Теоретическая физика V - структура вещества". К курсу лекций впервые прибавился практикум. Практические работы были задуманы для студентов, желающих углубленно изучить данный предмет. Любопытно отметить, что к решению задач всегда добавлялось домашнее задание - изготовление модели структуры заданного кристалла. Кроме того, студентам предлагались, начиная с 1929 г., темы конкурсных работ. Приведем некоторые их названия. Тема конкурсной работы 1929 г. - "Обзор о физических свойствах элементов, изменяющихся скачкообразно при полиморфных превращениях"; в 1936 г. - "Рентгенографические исследования некоторых бинарных сплавов"; в 1938 г. - "Систематика рентгенографически определенных структур некоторых групп бинарных сплавов".

В 1930 году Х. Перлитц посетил лаборатории физических исследований в Скандинавских странах и в Германии. Во время поездки он встретился с такими выдающимися исследователями структуры кристаллов, как А. Вестгрен в Стокгольме, Л. Вегард в Осло и В. Гольдшмидт в Геттингене. В начале тридцатых годов вокруг Х. Перлитца начинает формироваться группа молодых исследователей. Его первой сотрудницей стала ассистентка А. Спранцман-Линк, которая защитила магистерскую работу в 1931 г. [4]. В 1932 г. Х. Перлитц сам защитил докторскую диссертацию [5].

Первыми экспериментаторами, занимающимися созданием аппаратуры для структурных исследований, стали В. Коэрн и А. Алт-ма.

В 1934 г. при университете открывается лаборатория теоретической и технической физики. Рентгеновскую аппаратуру для лаборатории изготовил электромеханик университета Я. Мууга в сотрудничестве с В. Козрном. Источником рентгеновского излучения стала газоразрядная трубка типа Хэддинга. Выпрямление высокого напряжения осуществлялось механическим выпрямителем. Новый источник излучения позволил значительно увеличить мощность рентгеновского излучения и тем самым сократить время получения рентгенограмм.

Камеры для структурных исследований конструировались и изготавливались сотрудниками лаборатории. Отметим, что среди камер, применяемых для исследования кристаллов, была одна камера Вейсенберга, применяемая при комнатной температуре, и сконструированные Э. Аруя низкотемпературная и В. Козрном высокотемпературная камеры. Лишь в 1937 г. были получены заказанные в Латвии у Страуманиса две камеры, позволившие методом асимметрической закладки пленки провести особо точные определения параметров элементарных ячеек порошков [6, 7]. Эти камеры были основными инструментами исследований кристаллов и в течение 10–15 лет после войны.

В 1936 г. начал работать Таллинский технический институт (позднее Таллинский технический университет), куда перешли на преподавательскую работу сотрудники Х. Перлитца Г. Метс и Э. Аруя, защитившие ранее магистерские работы [1].

Интересующиеся структурными исследованиями студенты привлекались на работу в лабораторию в качестве вспомогательного персонала. Так начали свою научную деятельность А. Паэ и Б. Пуннис, которые после окончания университета стали полноценными членами коллектива лаборатории. Некоторое время работал в лаборатории и Х. Торгрен.

Летом 1940 г. Х. Перлицц был направлен на научную работу в Швецию, откуда он в Тарту не возвратился [1].

Подводя итог деятельности Х. Перлитца в качестве создателя нового направления экспериментальной физики в Тартуском университете, нам хочется подчеркнуть его комплексный подход к решению поставленной задачи. В течение многих лет он читал курс лекций по рентгенографии кристаллов вместе с решением задач, организовал практикум и предлагал темы конкурсных ра-

бот. Усовершенствовалась и материальная база лаборатории. Все это позволило Х. Перлитцу, несмотря на уход некоторых сотрудников, создать к началу 1940 г. небольшую группу исследователей, успешно занимающихся рентгеноструктурными исследованиями кристаллов.

После Великой Отечественной войны из группы Перлитца в Тарту остался лишь А. Паэ. Под его руководством и при непосредственном участии была восстановлена пострадавшая во время войны рентгеновская аппаратура. В течение нескольких послевоенных лет (до 1951 г.) эта аппаратура использовалась главным образом для проведения практических работ студентов, специализирующихся по физике.

Систематическая научная работа по рентгеноструктурному анализу возобновилась с 1951 г. работами А. Паэ и Л. Уйбо (первая послевоенная публикация [8]). Если Х. Перлиц и его сотрудники исследовали некоторые чистые металлы и их сплавы, то А. Паэ и Л. Уйбо начали изучать твердые растворы ионных соединений. Замена объектов исследования была обусловлена тем, что с 1951 г. под руководством нового ректора Тартуского государственного университета Ф.Д. Клемента при университете развернулись исследования люминесценции ионных кристаллофосфоров. Некоторые кристаллофосфоры светились при больших концентрациях активатора, т.е. основание и активаторное соединение образовывали в тех случаях твердые растворы, структурные свойства которых можно было установить рентгенографическими исследованиями.

## Л и т е р а т у р а

1. Rebane K.-S., Pae A. Röntgenstruktuurialased uurimused Tartu Ülikoolis ja Tallinna Tehnikaülikoolis (1925-1940) // Tehnilise mõtte ja tehnikabariiduse ajaloo probleeme Eesti II: Teadusuuringud. - Tallinn: TPI, 1985. - Lk. 104-110.
2. Perlitz H. On an apparent relation between the rate on change of the electric resistance and fusion and the crystal lattice of metallic elements // Phil. Mag. Ser. (7). - 1926. - Vol. 2, N 11. - P. 1148-1152.
3. Eesti Vabariigi Tartu Ülikooli ettelugemiste kava 1926. aasta I poolaastal. - Tartu: Postimees, 1926.

4. Sprantsman A. Über Herstellung makroskopische Talliumkristalle durch Elektrolyse // Acta et Comment. Univ. Tartuensis, A. - 1933. - 24. - 1-5 S, 6 pag.
5. Perlitz H. Abstandänderungen nächsten Nachbaratome in einigen Elementen und Legierungen bei Umordnung aus der kubischen flächenzentrierten Anordnung in die kubische raumzentrierte oder die hexagonal dichteste Anordnung // Acta et Comment. Univ. Tartuensis, A. - 1932. - 22. - 1-71 S, 4 pag.
6. Perlitz H., Aruja E. Die Struktur der intermetallischen Verbindung  $\text{NaAu}_2$  // Z. Kristallogr. (A). - 1938. - Bd. 100. - S. 157-166.
7. Aruja E., Perlitz H. Neubestimmung der Gitterkonstante von Natrium // Z. Kristallogr. (A). - 1938. - Bd. 100. - S. 195-200.
8. Паз А. Рентгенографическое исследование кристаллофосфоров  $\text{NH}_4\text{Cl} \cdot \text{TiCl}_3$  и  $\text{NH}_4\text{Br} \cdot \text{TiBr}_3$  // Тр. ИД АН ЭССР. - 1956. - № 4. - С. 26-35.



## ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ ДИСПЕРСИИ В КУРСЕ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

Х.И. Воолайд

Дисперсия света является одним из узловых вопросов в курсе оптики, поскольку здесь приходится связывать понятия из курсов механики, электричества и оптики. Часто причина зависимости показателя преломления от длины (или частоты) волны остается труднопонимаемой, тем более, что в школьном курсе физики об этом почти ничего не говорится.

Большинство авторов [1 - 5] начинает изложение материала по дисперсии света с эмпирической формулы Коши:

$$n = n_0 + \frac{a}{\lambda^2} + \frac{b}{\lambda^4} + \dots, \quad (1)$$

где  $n$  - показатель преломления,  $\lambda$  - длина волны света,  $a$ , и  $b$  - постоянные, зависящие от вещества.

В учебниках, которые изданы в последнее время [6, 7], об этой эмпирической зависимости не говорится.

Во всех учебниках дается более или менее корректный вывод дисперсионной формулы и получается результат типа:

$$n^2 = 1 + \frac{const}{\omega_0^2 - \omega^2}, \quad (2)$$

где  $\omega$  - угловая частота световых волн,  $\omega_0$  - собственная частота оптических электронов. Для иллюстрации дается графическое изображение этой зависимости. Но здесь единое мнение отсутствует. Даются зависимости  $n$  от  $\lambda$ ,  $n$  от  $\omega$ ,  $n^2 - 1$  от  $\omega$ ,  $n^2$  от  $\omega$ ,  $n$  от  $\frac{\omega}{\omega_0}$ . В конце раздела авторы анализируют полученную зависимость. Эмпирическая зависимость (1) обосновывается теоретически только в [1] и [2]. В остальных учебниках, которыми в основном пользуются студенты, вывод формулы (1) отсутствует.

Но это нельзя считать методически оправданным. Надо все-таки показать, каким образом из формулы (2) можно получить

формулу (I), или отказаться вообще от использования длины волны и везде использовать частоту, как делается в учебниках Сивухина и Матвеева [6, 7]. Даже в этих учебниках используют длину волны при описании некоторых явлений, тем более, что на практике часто все-таки говорят, что та или иная величина зависит от длины волны, а не от частоты.

Формулу (I) можно теоретически обосновать следующим образом. По электромагнитной теории света показатель преломления определяется равенством

$$n = \sqrt{\epsilon \mu},$$

где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость и  $\mu$  — магнитная проницаемость вещества. Для всех прозрачных диэлектриков  $\mu$  практически равна единице, поэтому имеем:

$$n^2 = \epsilon \quad (3)$$

Из курса электричества известно, что

$$\epsilon = 1 + \kappa, \quad (4)$$

где  $\kappa$  — диэлектрическая восприимчивость, которая связывает поляризацию  $P$  с напряженностью электрического поля :

$$P = \epsilon_0 \kappa E \quad (5)$$

Предположим, что в каждой молекуле имеется один оптический электрон, который совершает вынужденные колебания относительно неподвижного иона под действием электрического поля световой волны. В результате молекула становится диполем с дипольным моментом

$$p = e \chi,$$

где  $e$  — заряд электрона,  $\chi$  — смещение электрона относительно положения равновесия.

Поляризацию  $P$  можно найти, умножая дипольный момент электрона на концентрацию молекул  $N$ :

$$P = Np = Ne\chi \quad (6)$$

Из курса механики известно, что при вынужденных колебаниях смещение определяется следующим образом:

$$\chi = \frac{F_0 \sin(\omega t + \alpha)}{m \sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2 \omega^2}} \quad (7)$$

где  $F_0$  — амплитуда действующей силы на тело массой  $m$ ,  $\omega$  — частота вынуждающей силы (в данном случае частота световой

волны),  $\omega_0$  - собственная частота системы,  $\alpha$  - сдвиг фаз между вынужденным колебанием и вынуждающей силой,  $\beta$  - коэффициент затухания.

Если посмотреть дисперсию в области, где свет не поглощается, то можно считать, что  $\beta = 0$ . В таком случае и  $\alpha = 0$ . Поскольку  $F_0 = eE_0$ , получаем вместо формулы (7) следующее выражение:

$$x = \frac{e E_0 \sin \omega t}{m (\omega_0^2 - \omega^2)} = \frac{e E}{m (\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (8)$$

Из формул (6) и (8) получаем

$$P = \frac{e^2 N E}{m (\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (9)$$

Сравнение уравнений (5) и (9) дает

$$x = \frac{e^2 N}{\epsilon_0 m (\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (10)$$

Используя формулы (3), (4) и (10), можно получить, что

$$n^2 = 1 + x = 1 + \frac{e^2 N}{\epsilon_0 m (\omega_0^2 - \omega^2)}$$

В дальнейшем объединяем все постоянные величины и введем для их обозначения символ  $const$ .

Так мы имеем

$$n^2 = 1 + \frac{const}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

Теперь перейдем от частоты к длине волны  $\lambda$ , учитывая, что

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

где  $c$  - скорость света в вакууме. Тогда получим

$$n^2 = 1 + const \cdot \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2}$$

Учитывая, что

$$\frac{\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2} = 1 + \frac{\lambda_0^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2}, \quad \text{получаем}$$

$$n^2 = 1 + const \left( 1 + \frac{\lambda_0^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2} \right),$$

откуда

$$n = \sqrt{1 + const \left( 1 + \frac{\lambda_0^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2} \right)}$$

Если показатель преломления меньше 1,6, то с ошибкой меньше 10% можно пользоваться выражением приближенного вычисления:

$$\sqrt{1+z} \approx 1 + \frac{z}{2}$$

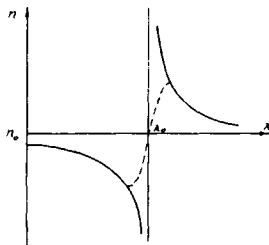
Отсюда

$$n = 1 + \text{const} \left( 1 + \frac{\lambda_0^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2} \right) = \text{const} + \frac{\text{const}}{\lambda^2 - \lambda_0^2}$$

Обозначив постоянные через  $n_0$  и  $\alpha$ , получаем

$$n = n_0 + \frac{\alpha}{\lambda^2 - \lambda_0^2} \quad (\text{II})$$

Эта зависимость изображена на рисунке, где тонкая вертикальная линия указывает положение линии поглощения  $\lambda_0$ .



Анализируя выражение (II), получаем, что в случае  $\lambda \gg \lambda_0$ , т.е. в области, далекой от линии поглощения,

$$n = n_0 + \frac{\alpha}{\lambda^2} \quad (\text{I2})$$

Эта формула совпадает с эмпирической формулой (I), взятой до двух первых членов. Значит, формулой (I) можно пользоваться только в случае малого поглощения, т.е. вдали от линии поглощения в сторону длинных волн.

Вблизи линии поглощения кривая дисперсии круто изгибается, приближаясь со стороны малых длин волн к  $-\infty$ , а со стороны больших длин волн к  $+\infty$ . Это происходит из-за того, что не учтен коэффициент затухания.

Если учитывать и затухание, получим ход кривой дисперсии, изображенной на рисунке пунктиром. В этой области говорят об аномальной дисперсии.

То обстоятельство, что при выводе формулы (I2) пришлось сделать ряд допущений, показывает, что эмпирическая формула (I) описывает дисперсию только в частных случаях, более общей является формула (2). Вопрос о том, для каких специальностей студентов стоит проделать весь вывод, решается препода-

давателем, но в каждом случае необходимо указывать, при каких условиях вообще можно теоретически обосновать формулу (I).

### Л и т е р а т у р а

1. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. - М.: Наука, 1970. - § 2.3.
2. Фриш С.Э., Тиморева А.В. Курс общей физики. - М.-Л.: ГИТТЛ, 1951. - Т. 3. - §§ 260-261.
3. Савельев И.В. Курс общей физики. - М.: Наука, 1973. - Т. 3. - § 45.
4. Ландсберг Г.С. Оптика. - М.: Наука, 1976. - § 156.
5. Калитеевский Н.И. Волновая оптика. - М.: Высшая школа, 1978. - §§ 4.2.-4.3.
6. Сивухин Д.В. Общий курс физики: Оптика. - М.: Наука, 1980. - § 84.
7. Матвеев А.Н. Оптика. - М.: Высшая школа, 1985. - § 15.

## КОМПЛЕКТ УЧЕБНЫХ ПОСОБИЙ ДЛЯ ПРЕПОДАВАНИЯ КУРСА МИКРОПРОЦЕССОРНОЙ ТЕХНИКИ

Т.Э. Ваякас, Э.Х. Келк, М.А. Фишер, М.М. Фишер,  
Ю.Ю. Халдре, Э.Ю. Ютс

Появление понятий "микропроцессор" и "микропроцессорный комплекс интегральных схем" связано с фирмой "Интел" (США), которая выпустила на рынок в начале 70-х годов дешевый комплект больших интегральных схем (БИС), разработанных для создания универсальных программируемых автоматов управления. За этим последовало бурное расширение производства микропроцессоров и внедрение их во все основные сферы человеческой деятельности. Объясняется это тем, что при проектировании и изготовлении микропроцессоров и остальных интегральных схем микропроцессорного комплекта выполнена основная работа, необходимая для создания микроЭВМ. Для изготовления микроЭВМ необходимо лишь знать, как соединить в схему от нескольких до нескольких десятков БИС. Проектирование ЭВМ вышло за пределы больших институтов, стало объектом технического творчества рядовых инженеров и даже радиолюбителей. МикроЭВМ является дешевым универсальным автоматом, назначение которого можно определить после его изготовления написанием программы.

Наглядно характеризуют путь быстрого внедрения микропроцессоров следующие данные. Если спустя 10 лет после выхода на рынок мини-ЭВМ их общее количество в мире оценивалось равным 200 тысячам, то выпуск микропроцессоров превышал сотни миллионов экземпляров в год. В 1982 году лишь фирма Дженерал Моторс в США устанавливала на своих автомобилях 25 тысяч микропроцессоров в сутки. На рынке появляется новый класс компьютеров – персональные ЭВМ, объем производства которых в мире уже превышает 10 миллионов экземпляров в год [1].

Широкое внедрение вычислительной техники в производство

считается основным признаком современной научно-технической революции, следствием которой является освобождение людей в производстве от прямых обязанностей управлять станками. От того, насколько успешно внедряется вычислительная техника в производство и научные исследования, зависят не только экономический и научный потенциал, но и обороноспособность страны. Этим объясняется и важность задач, поставленных перед системами общего среднего, среднего специального и высшего образования страны в области внедрения новейшей вычислительной техники в учебный процесс.

К сожалению, система образования далеко не готова к решению этих задач ни на уровне учебно-методических разработок, ни на уровне материально-технической базы. До сегодняшнего дня многое в деле преподавания этой важной области знаний базируется на энтузиазме преподавателей. В этом плане на отделении физики ТГУ совместно со студенческим КБ ТГУ разработан комплект учебных пособий для преподавания курса микропроцессорной техники.

В описываемый комплект входят:

- комплект слайдов для иллюстрации вводной лекции курса;
- комплект транспарантов для представления на лекциях всей необходимой графической информации;
- комплект раздаточного материала "Схемы к курсу микропроцессорной техники" [2];
- учебное пособие - справочник "Описание системы команд микропроцессора КР580ИВ80" [3];
- учебная микроЭВМ - тренажер "КИТ8080";
- описание и инструкция тренажера "КИТ8080";
- реферативная карточка пользователя тренажером.

I. Комплект слайдов содержит более 150 снимков с фотографий, напечатанных в журналах и в рекламных проспектах. При помощи слайдов легко наглядно объяснить, что такое микропроцессор, микроконтроллер, микроЭВМ, персональный компьютер. Основной целью лекции является объяснение слушателям того, что кроме вычислений микроЭВМ способны еще:

- запоминать большое количество информации и быстро находить необходимую информацию;

- писать и рисовать;
- говорить, видеть и читать;
- оказать почтовые услуги;
- понять даже устно заданные команды,

что компьютеры с такими способностями могут помочь или даже заменить человека при большинстве работ. Обсуждаются переход от принципа централизованных вычислительных мощностей к принципу распределения вычислительных мощностей и связанные с этим последствия в производстве, в научных исследованиях, обработке информации, системе образования и обороноспособности страны.

Хорошо иллюстрированная вводная лекция вызывает у слушателей интерес к вычислительной технике и объясняет, почему у нас уже сейчас обучение использованию этой техники считается столь важным, — убеждает в перспективности учебы.

## 2. Комплекты транспарантов и раздаточного материала

При составлении программы курса и проектировании необходимых учебных пособий учитывалось, что:

- у студентов нет предварительных знаний в области микропроцессоров и микроЭВМ;
- микропроцессоры проникают во все основные области техники и, следовательно, курс микропроцессорной техники должен стать элементом общего образования;
- преподавание общеобразовательного курса по микропроцессорной технике требует представления большого количества графической информации;
- корректное представление графического материала при помощи доски-мела и его конспектирование занимают в несколько раз больше лекционного времени, чем содержательная часть лекции;
- студентам физического отделения необходимо, кроме общего образования, представить и конкретные материалы, позволяющие наиболее способным к самостоятельной работе студентам достичь квалификации разработчика и программиста микропроцессорных устройств;
- отсутствуют подробные учебники-справочники наших микропроцессорных комплектов интегральных схем;



- у нас накоплено достаточно подробной технической документации и учебников (на английском языке) о прототипах элементов серии КР580, существует опыт проектирования устройств на базе элементов этой серии.

Для представления необходимой на лекциях графической информации составлен комплект из 67 транспарантов для графопроектора. Для максимальной интенсификации лекционной части учебной работы выпущен комплект раздаточного материала. В последнем в дополнение к предъявляемым на лекциях рисункам приведено много справочных данных об элементах серии КР580. Таким образом, этот комплект используется и как учебное пособие, и как справочник. При выборе материала мы ограничились представлением тех данных, которые нужны при проектировании микроконтроллеров. Комплект является открытым. При необходимости сюда можно добавить новые листы, размноженные электрографическим способом.

### 3. Описание системы команд микропроцессора КР580ИИ80

Здесь приведено детальное описание всех команд этого микропроцессора. Описания содержат словесное объяснение действия команды, мнемокод, двоичный код, шестнадцатеричный код, алгоритм действия, число машинных тактов и циклов команды, способ адресации и действие на флажки. Все описания снабжены примерами. Это учебное пособие намного ускоряет темп объяснения системы команд на лекциях и служит справочником при самостоятельной работе и на практических занятиях.

### 4. Учебная микроЭВМ "КТ8080"

При проектировании этой машины в 1983 г. учитывалось, что:

- сказанное на лекциях необходимо закрепить на практических занятиях;
- для внедрения микропроцессоров в курсовые и дипломные проекты студентам нужны системы отладки аппаратуры и программ;
- учебные микроЭВМ-тренажеры серийно у нас не выпускаются и в течение нескольких лет их купить невозможно;
- изготовление машин класса персональных ЭВМ нам не под силу из-за непреодолимых трудностей снабжения не-

- обходимыми для них периферийными устройствами;
- основная доля применений микропроцессоров связана с внедрением микроконтроллеров в научные, производственные и бытовые устройства;
  - тренажер должен позволять программирование и отладку программ в мнемокодах команд.

Тренажер "KIT8080" является микроконтроллером, построенным на двух печатных платах. Он имеет полную латинскую клавиатуру, индикатор на 7-сегментных и матричных светодиодных индикаторных элементах, до 8 килобайт постоянной памяти, из которых 2 килобайта занимает монитор-программа, 4 килобайта - оперативная память, последовательный и 6 параллельных портов связи с внешними устройствами, 2 таймера и контроллер прерываний.

5. Описание и инструкция тренажера "KIT8080" являются рукописным учебным пособием, где приведены краткое описание архитектуры тренажера, адресация памяти и интерфейсных элементов, описание команд монитор-программы, описание и адресация ее подпрограмм.

Это учебное пособие используется на первых практических занятиях курса как руководство для ознакомления с тренажером, как справочник при последующих занятиях и при самостоятельной работе студентов. Составлена реферативная карточка, на которой приведены названия и короткие алгоритмические описания команд монитор-программы, а также названия, цель и адресация тех подпрограмм монитора, которые могут представлять для пользователя наибольший интерес.

В студенческом КБ ТГУ в учебных целях изготовлено 10 таких тренажеров. Они использовались в течение двух последних лет не только на практических занятиях студентов физического факультета и слушателей курсов повышения квалификации, но и при составлении курсовых и дипломных проектов, связанных с тематикой хозяйственных работ КБ. Для создания систем отладки спроектированы и изготовлены стыкующиеся с тренажером программаторы и эмуляторы постоянных запоминающих устройств.

Кроме отмеченных выше применений описываемого комплекта, он может служить учебным пособием для профтехучилищ и

быть использован там, где занимаются организацией технического творчества школьников. На республиканском конкурсе на лучшие разработки в области школьной информатики наш комплект учебных пособий завоевал в 1986 году третью премию.

### Л и т е р а т у р а

1. Громов Г.Р. Национальные информационные ресурсы. - М., 1984. - 237 с.
2. Fischer M., Kelk E. Joonised mikroprotsessorite loengukursuse juurde. - Tartu: TRÜ, 1985.
3. Fischer Malle ja Matti. Mikroprotsessori KP580MK80 käskude süsteem. - Tartu: TRÜ, 1985.

## К ВЫВОДУ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ЛОРЕНЦА

И.Р. Пийр

I. Изложение основ специальной теории относительности (СТО) в общем курсе физики завершается выводом преобразований Лоренца (ПЛ) и анализом основных кинематических и динамических следствий ПЛ. Этому предшествует обычно обстоятельная подготовительная работа: анализ бесплодных попыток обнаружения абсолютной системы отсчета, приводящий к установлению независимости скорости света в вакууме от движения источника и наблюдателя; обоснование и формулировка принципов СТО; ознакомление с проблемой сравнения хода часов и масштабов длины; установление относительности одновременности. Тем самым подтверждается необходимость обобщения классических преобразований Галилея для перехода из одной инерциальной системы  $\Sigma$  в другую  $\Sigma'$

$$\vec{r} = \vec{r}' + \vec{v} t, \quad t = t' \quad (I)$$

и ставится задача вывода ПЛ.

В учебной литературе нет канонизированного метода для вывода ПЛ, даже при традиционном подходе применяется множество разных методических приемов. Целью данных заметок не является обстоятельный обзор и анализ различных приемов. Здесь охарактеризованы и коротко прокомментированы лишь основные этапы вывода ПЛ. Более подробно обсужден, опираясь в основном на классическую работу [1], графический метод, заслуживающий, по нашему мнению, более серьезного внимания.

При выводе ПЛ исходят из следующих положений (см., например, [2]): 1) однородность пространства и времени, 2) изотропность пространства, 3) принцип относительности Эйнштейна, 4) постулат постоянства скорости света. Из первых двух вытекает линейность формул преобразования времени  $t$  и пространственных декартовых координат  $x, y, z$ ; однородность

этих формул связана с совпадением начал пространственных координат в общей для обеих инерциальных систем  $\Sigma$  и  $\Sigma'$  начальный момент времени  $t = t' = 0$ . К дальнейшим упрощениям приводит условие параллельности координатных осей. Окончательно задача конкретизируется ориентацией оси  $x$  вдоль скорости  $\vec{v}$  системы  $\Sigma'$  в системе  $\Sigma$ . Таким образом, искомые формулы должны иметь вид:

$$x' = \alpha x + \beta t, \quad y' = x y, \quad z' = x z, \quad t' = \lambda x + \mu t, \quad (2)$$

или для обратного перехода:

$$x = \alpha' x' + \beta' t', \quad y = x' y', \quad z = x' z', \quad t = \lambda' x' + \mu' t'. \quad (2')$$

Случаи (2) и (2') отличаются только направлением относительной скорости систем  $\Sigma$  и  $\Sigma'$ , которая и в том, и в другом случае перпендикулярна к плоскости  $yz$ . Но оба направления совершенно равноправны, поэтому  $x' = x$ . Совершая преобразование от  $y$  к  $y'$  и затем снова от  $y'$  к  $y$ , будем иметь  $x^2 = 1$ . Следовательно, при одинаковой ориентации осей  $y, z$  и  $y', z'$   $x = 1$  и

$$y = y', \quad z = z'. \quad (3)$$

Теперь можно продолжать по-разному. В [3] установлен закон преобразования скорости при движении по направлению оси  $x$ :

$$u' \equiv \frac{dx'}{dt'} = \frac{\alpha u + \beta}{\lambda u + \mu} \quad \left( u = \frac{dx}{dt} \right). \quad (4)$$

Из условий  $u = v$ ,  $u' = 0$  следует

$$\beta = -\alpha v, \quad (5)$$

из условий  $u = 0$ ,  $u' = -v$  следует

$$\mu = \alpha, \quad (5')$$

а из условия  $u = u' = c$  (постулат постоянства скорости света):

$$\lambda = -\frac{v}{c^2} \alpha. \quad (5'')$$

Таким образом,

$$x' = \alpha (x - vt), \quad (6)$$

$$t' = \alpha \left( t - \frac{v}{c^2} x \right). \quad (6')$$

На основе принципа относительности системы и эквивалентны, только относительные скорости этих систем будут

разного знака, следовательно,

$$x = \alpha (x' + vt') \quad (7)$$

$$t = \alpha (t' + \frac{v}{c^2} x) \quad (7')$$

Подстановкой  $x$  и  $t$  в формулы (6), (6') находится  $\alpha$ :

$$\alpha = [1 - (\frac{v}{c})^2]^{-\frac{1}{2}} \quad (8)$$

В [4, 5] эта же идея реализуется в иной последовательности. Сначала устанавливаются только формы преобразования  $x$  координаты (6), (7). С учетом того, что для светового сигнала, испущенного в момент совпадения обоих начал координат 0 и 0' (т.е. в момент  $t = t' = 0$ ) в направлении оси  $x$ ,

$$x = ct, \quad x' = ct' \quad (9)$$

(постулат постоянства скорости света), находится  $\alpha$  (8). Исключением из формул (6) и (7) соответственно  $x'$  или  $x$  получают формулы преобразования времени (6') и (7').

Некоторые авторы [6-10] считают, по-видимому, переход от формул (6), (6') к формулам (7), (7') не совсем обоснованным. Например, Г. Иос [6] обосновывает сначала формулу (6) и по аналогии для обратного перехода формулу

$$x = \alpha' (x' + vt'). \quad (10)$$

Затем, исключая из этих уравнений  $x'$ , находит

$$t' = \alpha [t - (1 - \frac{1}{\alpha'}) \frac{x}{v}]. \quad (11)$$

Из постулата постоянства скорости света вытекает, что уравнение фронта сферической световой волны в системах  $\Sigma$  и  $\Sigma'$  имеет одинаковый вид:

$$x^2 + y^2 + z^2 = c^2 t^2 \quad (12)$$

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = c^2 t'^2 \quad (12')$$

После подстановки значений (3), (6), (11) для штрихованных величин в уравнение (12') должно получиться уравнение (12).

---

\* Иногда уравнения (12), (12') представляют в виде 
$$x'^2 + y'^2 + z'^2 - c^2 t'^2 = x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2, \quad (12'')$$
 выражающем инвариантность интервала. Необходимо подчеркнуть, что в нашей задаче справедливость формулы (12'') опирается на соотношения (3) [7].

Это требование позволяет после довольно громоздких вычислений показать, что

$$\alpha' = \alpha = \left[1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}}.$$

Этот вывод значительно упрощается [7], если сначала обосновать оба соотношения (6) и (6'), а затем определить  $\alpha$  из уравнения фронта волны (12) и (12'). Разные модификации подхода, связанного с применением уравнений (12), (12'), применяются также в [8-10]. Для общего курса физики методический интерес представляет вариант, приведенный в [10].

В заключение этого короткого и неполного обзора обращаем внимание на учебник [11], где вывод III опирается на метод синхронизации хода часов в инерциальных системах  $\Sigma$  и  $\Sigma'$  и на прямое сравнение моментов происхождения определенного события в этих системах.

2. Даже при беглом просмотре учебной литературы [2-11] бросается в глаза, что для анализа и иллюстрации кинематических эффектов СТО почти не применяется введенное Минковским графическое представление событий на плоскости  $x, t$ . Это тем более удивительно, что оно позволяет наглядно изложить все кинематические эффекты СТО, связанные с движениями по оси  $x$ , а также вывод III.

Если для простоты в качестве меры времени использовать вместо  $t$  величину  $\tau = ct$ , то постулат постоянства скорости света означает, что световые сигналы, движущиеся по оси  $x$  вправо и влево, можно представить независимо от движения источника или наблюдателя в виде световых линий — прямых, наклоненных к оси под углом  $45^\circ$  (на рисунках изображены пунктиром). Движение частицы  $M$  изображается ее мировой линией. Мировыми линиями точек  $O, A, B$ , покоящихся на оси  $x$  (система  $\Sigma$ ), являются ось времени  $\tau$  и прямые, параллельные оси времени. Мировыми линиями точек  $O', A', B'$ , совпадающих в момент  $t = 0$  с точками  $O, A, B$ , но движущихся относительно системы  $\Sigma$  со скоростью  $v$  (система  $\Sigma'$ ), являются параллельные прямые, наклоненные к оси  $\tau$  под углом  $\alpha_\tau$ :

$\tan \alpha_\tau = \frac{v}{c} \equiv \beta$  (см. рис. 1). С помощью световых (в общем электромагнитных) сигналов и часов, находящихся в точке  $O$ , можно определить время происхождения произвольного события в любой другой точке (например, в точке  $A$ ) и тем самым син-

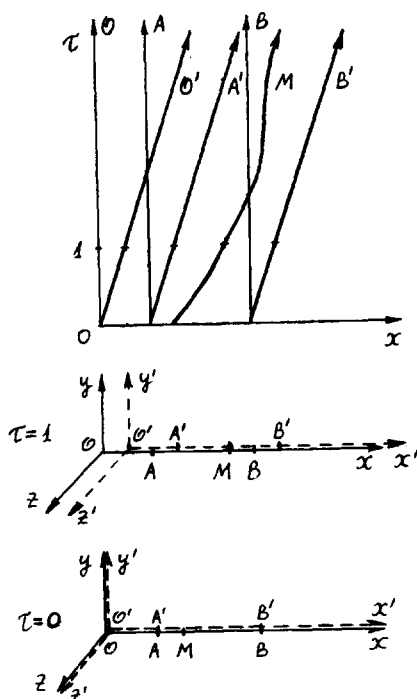


Рис. 1.

хронизировать ход часов в этих точках. Известная схема — из точки  $O$  в момент  $t_1$  испускается сигнал, в момент  $t_A$  он достигает точки  $A$  и мгновенно отражается, в момент  $t_2$  возвращается в точку  $O$ , и, наконец, моменту отражения  $t_A$  приписывается значение

$$t_A = \frac{1}{2}(t_1 + t_2) \quad (13)$$

изображена на рис. 2. Видно, что синхронизация покоящихся в  $\Sigma$  часов взаимна и одновременные события представляются точками на горизонтальных прямых  $\tau = \text{const}$ . Повторяя указанную схему для синхронизации часов в системе  $\Sigma'$  (рис. 3), можно установить относительность одновременности и показать, 1) что часы, покоящиеся в системе  $\Sigma'$  и синхронизированные в системе  $\Sigma$ , ходят в системе  $\Sigma'$  одинаково, но не синхронно (часы в  $A'$  отстают от часов в  $O'$  на  $\Delta t'_A$ ), 2) что часы в  $O$  и  $O'$



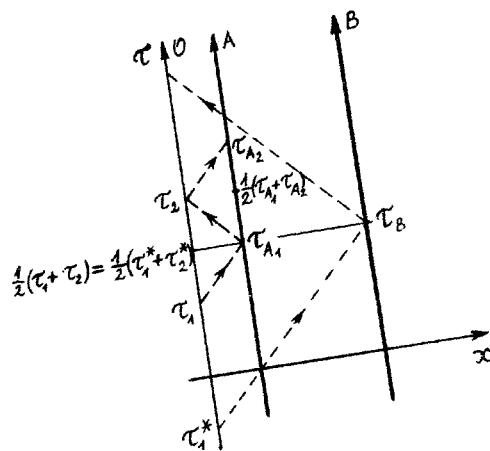
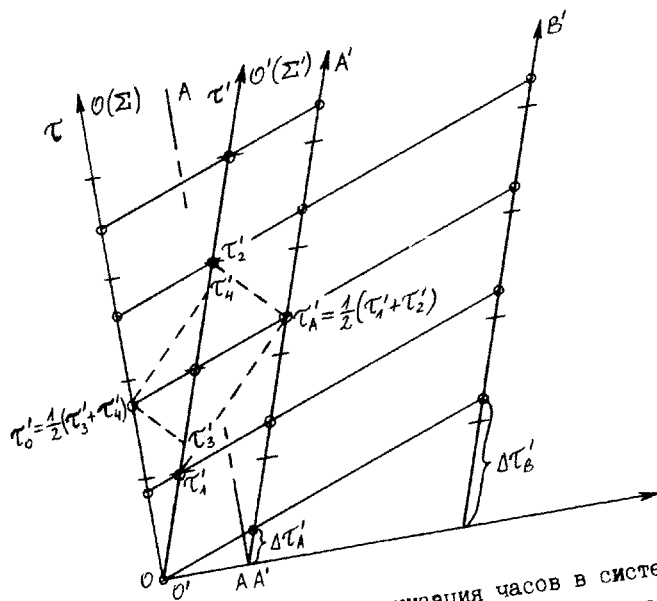


Рис. 2.



— синхронизация часов в системе  $\Sigma$ ,  
 o синхронизация часов в системе  $\Sigma'$ .

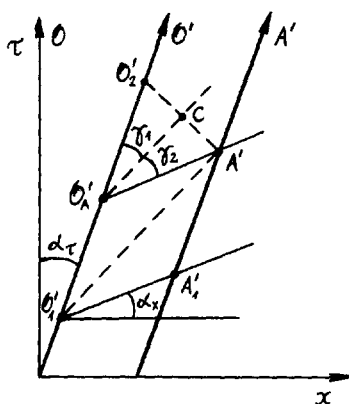
Рис. 3.

синхронизированные в системе  $\Sigma$ , ходят в системе  $\Sigma'$  не-одинаково (движущиеся в  $\Sigma'$  часы  $\theta$  ходят медленнее покоящихся часов  $\theta'$ ); 3) что отрезки, имеющие в системе  $\Sigma$  одинаковую длину, отличаются в системе по длине — отрезок  $\theta A$  короче, так как конец  $A$  проходит мимо точки  $A'$  раньше, чем конец  $\theta$  мимо точки  $\theta'$ .

Более тщательного рассмотрения требует установление существенного для вывода III факта, что линии одновременных в  $\Sigma'$  событий наклонены к оси  $x$  под углом  $\alpha_x = \alpha_\tau = \alpha$ , т.е.

$$\tan \alpha = \beta = \frac{v}{c} \quad (I4)$$

(см. рис. 4).



$$\begin{aligned} O'_1 O'_2 &= O'_1 O'_2 \\ \downarrow \\ O'_2 C &= C A' \\ \downarrow \\ \gamma_1 &= \gamma_2 \\ \downarrow \\ \alpha_\tau &= \alpha_x \end{aligned}$$

Рис. 4.

Для дальнейшего анализа следует уточнить понятие одинаковости эталонов времени и длины в обеих системах  $\Sigma$  и  $\Sigma'$ . Простейшая модель эталона времени (часов), играющая в СТО такую же познавательную роль, как в термодинамике обратимая машина Карно в качестве абсолютного термометра, основывается на неизменности эталона длины в направлении, перпендикулярном к направлению относительного движения двух инерциальных систем (см. (3)). Для установления этого факта достаточно сравнить длины двух измерительных линеек, покоящихся соответственно в системах  $\Sigma$  и  $\Sigma'$  и ориентированных по оси  $y$  ( $y'$ ) так, что центры линеек при прохождении их друг мимо друга совпадают. В

этом случае равенство их длин (одновременность совпадения их концов) можно установить только одновременно в обеих системах. Закрепив в обоих концах такой линейки зеркала перпендикулярно к линейке, получаем часы, ход которых определяется световым сигналом, движущимся туда и обратно между зеркалами. Если покоящиеся в обеих системах линейки имеют одинаковую длину  $\ell$ , то часы являются одинаковыми. Интервал между двумя последующими отражениями "качающегося" светового сигнала от одного из зеркал (период "светового маятника") в системе  $\Sigma'$ , где часы покоятся, равен

$$\Delta t' = \frac{2\ell}{c}.$$

В системе  $\Sigma$ , где часы движутся со скоростью  $v$ , путь этого сигнала длиннее (см. рис. 5) и интервал длиннее:

$$\Delta t = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (15)$$

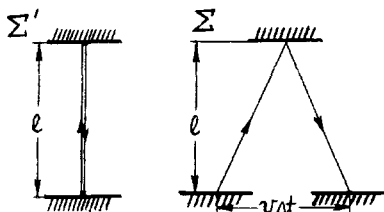


Рис. 5.

Таким образом, единичному интервалу времени в системе  $\Sigma'$  соответствует в системе  $\Sigma$  интервал  $(1 - \beta^2)^{-1/2}$ , измеряемый такими же часами, но покоящимися в системе  $\Sigma$ .

Установлением одинаковых эталонов времени в разных инерциальных системах фиксируются также одинаковые эталоны длины, независимо от их взаимной ориентации. Они определяются длиной пути, пройденного световым сигналом за единичный интервал времени  $\tau$ . Следовательно, единичному интервалу длины по оси соответствует интервал длиной  $(1 - \beta^2)^{-1/2}$ , измеряемый таким же эталоном, но покоящимся в системе  $\Sigma$ .

Из этих соображений видно, что событие, координаты которого в системе  $\Sigma'$   $x'$  и  $\tau'$ , должно иметь в системе  $\Sigma$  координаты  $x$  и  $\tau$  (см. рис. 6):

$$x = \frac{x'}{\sqrt{1-\beta^2}} + \frac{\tau'}{\sqrt{1-\beta^2}} \tan \alpha = \frac{x' + \beta \tau'}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (I6)$$

$$\tau = \frac{\tau'}{\sqrt{1-\beta^2}} + \frac{x'}{\sqrt{1-\beta^2}} \tan \alpha = \frac{\tau' + \beta x'}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

Эти формулы определяют III для перехода из системы  $\Sigma'$  в систему  $\Sigma$ . Для обратного перехода следует произвести замену  $\beta \rightarrow -\beta$

$$x' = \frac{x - \beta \tau}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \tau' = \frac{\tau - \beta x}{\sqrt{1-\beta^2}}. \quad (I7)$$

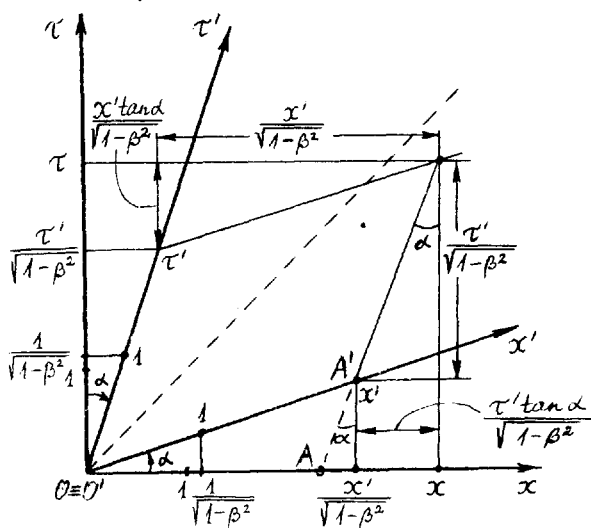


Рис. 6.

Необходимо отметить, что если длина линейки  $O'A'$  в ее системе покоя  $\Sigma'$  равна  $x' = l'$  то ее длина в системе  $\Sigma$ , где она движется, не будет  $l' (1 - \beta^2)^{-1/2}$ , а определяется длиной отрезка  $OA$ . Концы этого отрезка совпадают с концами линейки  $O'A'$  одновременно в смысле системы  $\Sigma$  (в нашем случае (см. рис. 6) в момент  $\tau = 0$ ). Следовательно, длина отрезка  $O'A'$  в системе  $\Sigma$

$$l = OA = \frac{l'}{\sqrt{1-\beta^2}} - \frac{l'}{\sqrt{1-\beta^2}} \tan^2 \alpha = l' \sqrt{1-\beta^2}. \quad (I8)$$

Это — известная формула лоренцового сокращения.

## Л и т е р а т у р а

- I. Борн М. Эйнштейновская теория относительности. - М.: Мир, 1972.
2. Терлецкий Я.П., Рыбаков Ю.П. Электродинамика. - М.: Высшая школа, 1980.
3. Яровский Б.М., Пинский А.А. Основы физики. - М.: Наука, 1981. - Т. I.
4. Савельев И.В. Курс общей физики. - М.: Наука, 1982. - Т. I.
5. Фриш С.Э., Тиморева А.В. Курс общей физики. - М.: ГИТЛ, 1952. - Т. 3.
6. Иос Г. Курс теоретической физики. - М.: Изд-во Мин-ва просвещения РСФСР, 1963. - Т. I.
7. Бредов М.М. и др. Классическая электродинамика. - М.: Наука, 1985.
8. Джексон Дж. Классическая электродинамика. - М.: Мир, 1965.
9. Детлаф А.А., Яворский Б.М. Курс физики. - М.: Высшая школа, 1980. - Т. 3.
- Ю. Киттел Ч. и др. Курс физики: Механика. - М.: Наука, 1983.
- II. Сивухин Д.В. Общий курс физики: Оптика. - М.: Наука, 1980.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ  
ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ ВЯЗКОСТИ ЖИДКОСТИ  
ИЗ КРУТИЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ ДИСКА

Я.И. Сальм

Метод крутильных колебаний диска в практике вискозиметрии уступает многим другим методам по распространенности. Тем не менее, он имеет свои положительные черты и неоднократно оказывал услуги в научных исследованиях [1, 2], а также применяется в учебных лабораториях [3, 4, 5, 6, 7]. Например, этот метод хорошо подходит для определения вязкости плавленных металлов и солей [2]. Достоинством его в учебных лабораториях является то, что кроме явления внутреннего трения наглядно наблюдаются и затухающие механические колебания. Интересно отметить, что с самого начала этот метод разрабатывали многие выдающиеся физики: Кулон, Стокс, Максвелл и др. [1]. Нами эта тематика затронута на методическом семинаре [8]. До сих пор в учебной литературе отсутствует доступное изложение теоретических основ вышеупомянутого метода.

Целью настоящей статьи является изложение теоретических основ названного метода в простейшей форме. Допустим, что горизонтальный тонкий диск, подвешенный тонкой нитью в центре, совершает крутильные колебания вокруг вертикальной центральной оси. Диск погружен в неограниченный объем жидкости. Допустим, что глубина распространения возмущений в жидкость намного меньше радиуса диска, а скорость движения диска достаточно мала для пренебрежения инерционными эффектами движения жидкости. Тогда можно пренебречь криволинейностью движения и рассматривать колебания элементов диска как прямолинейные.

Рассмотрим малый элемент  $\Delta$  поверхности диска на расстоянии  $r$  от центральной оси. Его линейная скорость —  $u$ . Напра-

вим ось  $y$  вертикально от элемента  $\Delta$  в жидкость, а ось  $x$  — в направлении движения элемента  $\Delta$ .

Если поместить диск в жидкость и привести его в состояние крутильных колебаний, то вследствие действия сил трения в жидкости (диссипации энергии) колебания будут затухать. Дифференциальное уравнение затухающих крутильных колебаний имеет вид:

$$I \ddot{\varphi} = -D\varphi - R'\dot{\varphi}, \quad (I)$$

где  $\varphi$ ,  $\dot{\varphi}$  и  $\ddot{\varphi}$  — соответственно угловое смещение, угловая скорость и угловое ускорение диска;  $I$  — момент инерции диска;  $D$  — модуль кручения проволоки и  $R'$  — момент сил трения, действующих на диск, вращающийся с единичной угловой скоростью.

Решение уравнения (I) имеет вид:

$$\varphi = \Phi_0 \exp(-\delta t) \cos \omega t, \quad (2)$$

где  $\Phi_0$  — начальная амплитуда углового смещения,  $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \delta^2}$  — круговая частота колебаний,  $\omega_0 = \sqrt{D/I}$  — круговая частота колебаний при отсутствии трения,  $\delta = R'/2I$  — коэффициент затухания.

Колеблющийся диск захватывает собой прилегающий слой жидкости. Этот слой передает движение (импульс) дальше следующим слоям жидкости, а, с другой стороны, оказывает силу трения на диск. Движение вязкости жидкости описывается уравнением Навье-Стокса, которое в настоящем случае, в приближении плоской колеблющейся стенки, имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \quad (3)$$

где  $u$  — скорость жидкости в направлении оси  $x$ ,  $\nu = \eta/\rho$  — кинематическая вязкость жидкости,  $\eta$  — динамическая вязкость (сокращению: вязкость) жидкости и  $\rho$  — плотность жидкости.

Уравнение (3) является дифференциальным уравнением в частных производных параболического типа, и оно известно как уравнение диффузии и теплопроводности.

Краевыми условиями для скорости  $u(y, t)$  являются: а) скорость жидкости равна скорости диска при  $y = 0$  и б)  $u(y, t) \rightarrow 0$  при  $y \rightarrow \infty$ .

Угловую скорость диска можно найти из формулы (2) диф-

ференцированием

$$\dot{\phi} = -\phi_0 \exp(-\delta t) (\delta \cos \omega t - \omega \sin \omega t). \quad (4)$$

Это такие же затухающие колебания, как по формуле (2), но сдвинутые в фазе. Линейная скорость какого-то участка диска

$$u(0, t) = r \dot{\phi}. \quad (5)$$

Решение уравнения (3) надо найти при краевом условии (5). Однако для упрощения учтем предположение о малости затухания

$$\delta \ll \omega. \quad (6)$$

и получим из (4) и (5) краевое условие

$$u(0, t) = -u_0 \sin \omega t, \quad (7)$$

где  $u_0 = \phi_0 \omega r$ .

Стационарным решением уравнения (3) при вышеуказанных краевых условиях является

$$u(y, t) = -u_0 \exp(-ky) \sin(\omega t - ky), \quad (8)$$

где

$$k = \sqrt{\omega/2\nu} = \sqrt{\omega\rho/2\eta} = \sqrt{\pi\rho/\eta T}. \quad (9)$$

Решение (8) представляет собой затухающую волну в направлении  $y$ . Величину  $k$  можно назвать волновым числом. Она же определяет затухание волны. На расстоянии  $1/k$  амплитуда скорости уменьшается в  $e$  раз. Длина волны

$$\lambda = 2\pi/k = 2\pi\sqrt{2\nu/\omega}. \quad (10)$$

На расстоянии длины полуволны амплитуда составляет 4,3% от начальной, на расстоянии длины волны волна практически затухла (с точностью 0,2%).

Согласно закону Ньютона, на элемент площади  $\Delta$  диска действует тангенциальная сила

$$F = \eta \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0} \cdot \Delta. \quad (11)$$

Определим градиент скорости

$$\left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0} = u_0 k (\sin \omega t + \cos \omega t). \quad (12)$$

Из формул (11) и (12) получим

$$F = u_0 k \eta (\sin \omega t + \cos \omega t) \Delta. \quad (13)$$



Как видно из (I3), сила трения в фазе всегда на  $\pi/4$  запаздывает от углового смещения диска, а на  $\pi/4$  опережает отрицательную скорость элемента диска.

За один период  $T = 2\pi/\omega$  этот элемент совершает в жидкости работу

$$A_1 = \int_0^T F \mu(0, t) dt. \quad (I4)$$

Совершив интегрирование,

$$A_1 = -\pi \mu_0^2 k \eta \Delta / \omega. \quad (I5)$$

Поскольку трение о жидкость происходит с двух сторон диска,

$$A_2 = 2A_1 = -2\pi \mu_0^2 k \eta \Delta / \omega. \quad (I6)$$

Теперь учтем то обстоятельство, что работа сил трения уменьшает кинетическую энергию колебаний диска (или полную энергию системы диск-нить), что в конечном счете и приводит к затуханию колебаний диска. При этом достаточно рассматривать лишь один элемент диска с площадью торца  $\Delta$  и толщиной  $h$ . Каждый такой элемент имеет массу  $\rho_k h \Delta$  и амплитуду кинетической энергии

$$W_k = \rho_k h \mu_0^2 \Delta / 2, \quad (I7)$$

где  $\rho_k$  — плотность диска.

Произведение  $\mu_0^2 \Delta$  встречается в обеих формулах — (I6) и (I7). Вставим его выражение из (I7) в (I6), тогда

$$A_2 = -\frac{4\pi k \eta W_k}{\rho_k h \omega} \quad (I8)$$

т.е. совершенная каждым элементом диска работа за каждый период колебания пропорциональна амплитуде кинетической энергии этого же элемента. Поскольку формула (I8) не зависит от площади элемента диска, то это утверждение можно распространить на весь диск.

Для нахождения коэффициента затухания  $\delta$  в вышеупомянутом предположении о малости затухания ( $A_2 \ll W_k$ ) рассмотрим уменьшение энергии диска как монотонный непрерывный процесс. Итак, за каждый малый промежуток времени  $dt$  энергия диска уменьшается пропорционально  $\delta t$

$$dW_k = A_2 dt / T. \quad (19)$$

Вставим в полученную формулу выражение  $A_2$  из формулы (18), тогда

$$dW_k = - \frac{4 \pi k \eta W_k dt}{\rho_k h \omega}. \quad (20)$$

Отсюда с учетом того, что  $\omega = 2\pi/T$ , получим дифференциальное уравнение

$$\frac{dW_k}{W_k} = - \frac{2 k \eta dt}{\rho_k h}. \quad (21)$$

Проинтегрировав последнее уравнение, имеем

$$W_k = W_0 \exp\left(- \frac{2 k \eta t}{\rho_k h}\right), \quad (22)$$

где  $W_0$  — начальная амплитуда кинетической энергии. Видно, что амплитуда кинетической энергии уменьшается экспоненциально. Учтем то обстоятельство, что амплитуда кинетической энергии пропорциональна квадрату амплитуды углового смещения диска

$$W_k \sim \phi^2, \quad (23)$$

следовательно,

$$\phi(t) = \phi_0 \exp\left(- \frac{k \eta t}{\rho_k h}\right), \quad (24)$$

а коэффициент затухания

$$\delta = \frac{k \eta}{\rho_k h}.$$

Раскрыв волновое число по формуле (9), получим

$$\delta = \frac{\sqrt{\rho \eta \omega}}{\sqrt{2} \rho_k h}. \quad (25)$$

Обычно в экспериментах определяется логарифмический декремент затухания  $\theta$ , который можно выразить:

$$\theta = \ln \frac{\phi(t)}{\phi(t+T)} = \delta T = \frac{\sqrt{\pi \rho \eta T}}{\rho_k h}. \quad (26)$$

Отметим, что в случае слабого затухания логарифмический декремент можно интерпретировать как отношение расхода энергии в течение полупериода колебания к начальной энергии. Вязкость жидкости выражается через логарифмический декремент в виде:

$$\eta = \frac{\rho_k h^2 \theta^2}{\pi \rho T} \quad (27)$$

Подчеркиваем, что конечная формула (27) действительна в вышеупомянутых предположениях. Прежде всего, затухание должно быть слабым, что можно проверить условием  $\theta \ll 1$ . Длина волны  $\lambda$  должна быть намного меньше радиуса диска  $R$ , что можно проверить с помощью формулы (10). Малость инерционных эффектов проверяется значением числа Рейнольдса  $Re = \phi_0 \omega R^2 / \nu$ , которое должно быть достаточно малым (не более порядка единицы). Диск должен быть тонким ( $h \ll R$ ), нить — также тонкой, а диссипация энергии в ней — пренебрежительно малой. Отступления от сделанных предположений внесут погрешности, которые нужно специально изучить.

### Л и т е р а т у р а

1. Maxwell J.C. On the viscosity or internal friction of air and other gases // Phil. Trans. Roy. Soc. London. - 1866. - Vol. 156. - P. 241-268.
2. Fawsitt C.E. On the determination of viscosity at high temperatures // Proc. Roy. Soc. - 1908. - Vol. A80. - P. 290-298.
3. Богданова Г.Н., Субботина Е.П. Руководство к практическим занятиям по физике. - М., 1949. - Ч. I.
4. Яковлев К.П. Физический практикум II. - М.-Л., 1949.
5. Андроникашвили Э.Л. и др. Лабораторные работы по физике. - М., 1961.
6. Физический практикум I / Сост. Э.И. Тамм. - Тарту, 1970.
7. Руководства к лабораторным работам по молекулярной физике / Сост. Я.И. Сальм. - Тарту, 1981.
8. Сальм Я.И. Определение вязкости жидкости методом крутильных колебаний диска // Актуальные вопросы методики преподавания физики: Тез. докл. VI зонального совещ.-сем. - Рига, 1977. - С. 82.

## ВОПРОСЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ТЕОРИИ ПОДОБИЯ В ОБЩЕЙ ФИЗИКЕ

З.Н. Бихеле, Г.А. Бихеле

### Часть I. Проблемы моделирования

Моделирование является основным методом познания окружающего мира, происходящих в нем явлений и процессов. Оно широко применяется в науке, технике, экономике, искусстве и в повседневной жизни. При моделировании исследуется не непосредственно интересующая нас система, а некоторая вспомогательная вещественная или умозрительная система, находящаяся в каком-либо объективном соответствии с изучаемой системой и способная замещать ее на определенных стадиях познавательного процесса.

Моделирование как метод научного познания часто используется при разработке теории изучаемого явления, а также в том случае, когда непосредственное исследование не представляется возможным или нецелесообразно. Например, исследование аэрогидродинамических характеристик крупных объектов (самолетов, кораблей), проблем атомной энергетики, вопросов астрофизики, микромира и др.

Функции модели может выполнять либо специально разработанная установка, либо мысленный образ или символическое (знаковое) описание оригинала и его свойств. Таким образом, моделью может быть текстовое описание, математическое уравнение, чертеж, блок-схема — одним словом, все, что находится в определенном соответствии с изучаемым объектом и может быть использовано в процессе исследования для получения интересующей нас информации.

Понятие модели охватывает не только научные, но и все прочие модели: технологические, производственные, эстетические и др.

Современная форма реализации моделей – это моделирование на ЭВМ.

Одной из наиболее существенных мысленных операций в процессе моделирования является абстрагирование и идеализация. Научное, в особенности теоретическое познание характеризуется тем, что предметом его исследования являются абстрактные объекты, которые формулируются человеком в ходе изучения данного вопроса. Таковыми, например, считаются понятия "материальной точки", "идеального газа", "абсолютно черного тела", "сосредоточенной силы" и др.

В настоящее время все больше ученых склоняется к мнению, что все наши научные представления о природе, технике, о мышлении и его закономерностях носят модельный характер [1]. В этом смысле моделями являются и физические законы, и теории. Так, законы Ньютона, Кулона, Био-Савара-Лапласа и др., а также теории электромагнитного поля, строения атома, относительности и т.д. – все они могут рассматриваться как модели соответствующих явлений и процессов в окружающем нас мире.

Однако при таком широком понимании понятия модели возникает вопрос, не подменяет ли оно таких исторически сложившихся и общепринятых научных понятий, как закон и теория. Очевидно все же, что здесь речь идет о разных аспектах этих понятий. Так, закон, гипотеза, теория, кроме прочего, характеризуют и то место, которое они как объекты познания занимают в исторически сложившейся области научных представлений. Утверждение же модельной природы этих понятий указывает на характер и особенности их связи с теми объектами и процессами реального мира, свойства которых они отражают.

Следует при этом отметить, что в понятие модели не входят все построенные из идеализированных абстрактных объектов теоретические системы – уравнения, теоремы, алгоритмы и любые другие формализации, пока они не интерпретированы применительно к материальным или информационным объектам реальности.

Так, дифференциальное уравнение  $A\ddot{x} + B\dot{x} + Cx = 0$

представляет собой лишь некоторую математическую конструкцию. Это уравнение может служить математической моделью свободных колебаний в электрическом контуре, состоящем из индуктивности, емкости и омического сопротивления, или колебаний подвешенного на пружине и снабженного демпфером груза, в зависимости от физического толкования входящих в это уравнение величин.

Во многих случаях можно выделить два основных вида используемых моделей: рабочие и исследовательские. Рабочие модели используются для замены каких-либо систем, для имитации их действий. Примерами их могут служить мультипликаторы, протезы, автопилоты, куклы, деньги и т.п. Поскольку при этом модель имитирует лишь часть свойств исходного объекта, то она оказывается в целом проще его оригинала.

В науке и технике широко используются исследовательские модели. Их, в свою очередь, можно подразделить на экспериментальные (вещественные) и концептуальные (умозрительные).

Экспериментальные модели представляют собой устройства двух основных типов.

1. Модели, имеющие ту же природу, что и моделируемый объект, и воспроизводящие в соответствующем масштабе основные геометрические, физические и функциональные характеристики оригинала.

2. Аналоговые модели, связывающие свойства и характеристики явлений различной природы. Они создаются на основе аналогий — обычно на совпадении вида математических уравнений, описывающих процессы в оригинале и его модели. Такие аналогии усматриваются, например, при сопоставлении явлений переноса массы, импульса, энергии и электрического заряда.

Экспериментальные модели строятся на основе теории подобия, которая дает количественное соотношение между параметрами сопоставляемых объектов и явлений [2]. Подобие основывается на анализе уравнений, описывающих эти процессы, а также на анализе размерностей, входящих в эти уравнения физических величин. Основными характеристиками, с помощью которых устанавливаются закономерности взаимод однозначного соответствия модели оригиналу, являются критерии подобия. Они представляют собой составленные из параметров системы и происходящих в ней

процессов безразмерные комбинации, которые для подобных явлений должны иметь одинаковые численные значения. Таким образом, теория подобия указывает условия, позволяющие распознать соответствие модели натуре или обеспечить его при построении модели. (Подробнее этот вопрос будет рассмотрен во второй части настоящей статьи.)

Остановимся теперь несколько подробнее на концептуальных (понятийных) моделях. Они формулируются на языке той или иной науки. Можно говорить, например, о физической, биологической, экономической и др. модели. Все они имитируют реальные объекты с помощью абстрактных представлений соответствующей науки и, как правило, с широким использованием языка математики [3, 4]. В последнем случае принято говорить уже о математической модели, соответственно, физического, биологического, экономического и др. процесса.

В зависимости от решаемых с помощью моделей проблем их можно разделить на структурные — исходящие из внутреннего строения системы и взаимодействия различных ее частей и стремящиеся ответить не только на вопрос "как", но и "почему", и на функциональные — описывающие лишь поведение моделируемой системы в данных условиях.

К числу функциональных моделей относятся, например, модели типа "черный ящик". В этих моделях воспроизводят функциональную зависимость между параметрами, определяющими реакцию системы на внешние воздействия. При этом не учитывается структура оригинала, физические свойства его элементов, а принимается во внимание только связь "входных" внешних возмущений и "выходных" реакций системы. Это позволяет создать модель, которая в той или иной форме описывает отклик оригинала на внешние возмущения.

Без умозрительных моделей не обходится ни одна область физики. Описывая и объясняя явления, вскрывая их закономерности и предсказывая еще неизвестные факты, физика вместе с другими естественными науками дает теоретическое отражение материального мира.

Понятия и постулаты, уравнения и формулы, схемы, чертежи и графики — вот знаки, употребляемые в языке физических теорий. Построение физических моделей начинается с выявления

существенных для изучаемого объекта (явления) свойств, закономерностей, которые должны быть выявлены, абстрагированы от всех второстепенных, несущественных факторов.

В простейших случаях функциональные модели лишь описывают взаимосвязи между непосредственно наблюдаемыми из опыта величинами. Они характерны для начальной стадии научного познания, при выявлении эмпирических закономерностей, построении феноменологических теорий. Все эмпирические законы — газовые законы Бойля-Мариотта, Гей-Люсака, законы классической термодинамики, преломления света, радиоактивного распада и др. — представляют собой функциональные модели феноменологического типа.

По мере развития научного познания, раскрытия наиболее существенных связей между явлениями строятся уже более абстрактные модели с учетом структуры и внутренних взаимосвязей моделируемой системы. Функциональный подход в моделировании уступает место структурному. Так, молекулярно-кинетические модели дают возможность объяснить диффузию, внутреннее трение, теплопроводность и ряд других явлений в среде. Структурный подход послужил основой формирования статистической термодинамики, которая исходя из анализа микроструктуры процессов позволила не только описать, но и объяснить интегральные закономерности.

В ряде случаев для объяснения одного и того же физического явления можно построить несколько различных моделей. Так, кроме уравнения Ван дер Вальса известны десятки других уравнений состояния реального газа, полученных на основании эмпирических данных, а также теоретических соображений.

Иногда модели одного и того же явления могут быть даже взаимоисключающими. Причем не всегда имеющаяся информация позволяет сразу выявить адекватную модель. Так было с первыми научными моделями света. И корпускулярная модель Ньютона, и волновая модель Гюйгенса до поры до времени достаточно убедительно объясняли основные оптические явления. Более полутора столетий понадобилось, чтобы окончательно отказаться от ньютоновской модели. Правда, и модель Гюйгенса была заменена электромагнитной моделью Максвелла, которая в дальнейшем



также оказалась неспособной объяснить вновь открываемые оптические явления. Двойственная природа света потребовала квантового подхода, основы которого были заложены в работах Планка и Эйнштейна.

Следует упомянуть также о различных моделях эфира, дискуссия о котором дали толчок созданию частной теории относительности. На всем протяжении развития физики коренным изменениям подверглась модель атома: от неделимой частицы в представлениях Демокрита к планетарной модели Резерфорда и к квантовым моделям Бора и Шредингера.

Для моделей начального периода развития физики характерен их строгий детерминизм. Они опирались на представления Лапласа—Ньютона, согласно которым, располагая информацией о начальном состоянии системы, можно предсказать ее состояние в любой другой момент времени. Таким характером обладают не только законы классической механики, но и законы электромагнетизма, сформулированные в уравнениях Максвелла. Следствия, которые вытекают из этих законов, являются однозначными и достоверными.

С развитием теории вероятности и теории случайных процессов стали создаваться вероятностно-статистические или стохастические модели, что существенно изменило характер научных взглядов в физике. В этих моделях предсказания поведения системы имеют вероятностный характер, а информация, на которой основывается модель, является статистической по природе.

Применение стохастических моделей диктуется самой природой явлений. В одних случаях речь идет о системах с очень большим числом объектов (например, число молекул в данном объеме газа) или когда приходится учитывать совокупность действия большого числа случайных событий, в других — об особенностях самих объектов. Так, вероятностные предсказания в квантовой механике обусловлены самим характером движения частиц, их корпускулярно-волновым дуализмом, принципом неопределенности.

По мере углубления физики в изучение все более сложных процессов усложняются и соответствующие математические модели, отображающие конкретную действительность в математичес-

ких абстракциях. По построении математической модели теперь зачастую отвлекаются от конкретной физической природы явления и сосредотачиваются на исследовании самой модели — на составлении уравнений, анализе их решений и выведении из них следствий. При этом в известной мере изменяется роль математики в физическом познании. Если в классической физике модель строилась преимущественно на основе качественных исследований и только после этого к ней применялась математика, то в современной физике часто сначала строят математическую модель, а затем находят подходящую физическую интерпретацию. Насколько плодотворным оказался этот метод, показывают факты предсказания существования ряда микрочастиц и их свойств задолго до того, как они были обнаружены экспериментально. Более того, при создании как матричного варианта квантовой механики (Гейзенберг), так и волнового варианта (Шредингер) исследователи основывались на математической гипотезе, экстраполируя уже известные уравнения (правда, в модифицированном виде) на совершенно новую область.

Математические гипотезы как эвристические средства познания используются для построения теоретических моделей таких процессов, которые трудно или вообще невозможно представить с помощью обычных, наглядных моделей.

Исследование самих математических моделей — математический эксперимент — стало в настоящее время мощным средством теоретических исследований в физике. Фактически речь идет о новой системе физического познания, которая органически связывает математическую модель, вычислительный алгоритм, расчеты на ЭВМ и физический эксперимент.

Следует остановиться еще на одной чрезвычайно важной форме умозрительного (концептуального) моделирования — мысленном эксперименте. Мысленный эксперимент является широко используемым методом научного исследования. Его значение на протяжении всей истории развития физики было и остается чрезвычайно важным. Классическим является пример мысленного эксперимента Галилея с шаром, скатывающимся по наклонной плоскости, который позволил открыть принцип инерции и опровергнуть утверждение Аристотеля о том, что для поддержания движения тела необходимо воздействие на него других тел.

Мысленный эксперимент является относительно самостоятельной познавательной операцией, незаменимым методом объективного анализа действительности. Так, Максвелл, оперируя модельными представлениями о молекулах газа как о шарах, получил в мысленном эксперименте "парадоксальный" результат, согласно которому коэффициент трения газа не зависит от его плотности, что в дальнейшем было подтверждено как в реальном эксперименте, так и обосновано теоретически.

С помощью мысленного эксперимента с вращающимся ведром, наполненным водой, Ньютон обосновал наличие абсолютно неподвижного пространства.

Мысленный эксперимент Карно, проанализировавшего работу идеальной тепловой машины, позволил в дальнейшем сформулировать второе начало термодинамики и принцип возрастания энтропии.

В свою очередь, "демон Максвелла" обнаружил противоречие между вторым началом термодинамики и молекулярными представлениями, что привело к развитию статистической интерпретации энтропии.

В процессе формирования специальной и общей теории относительности мысленный эксперимент играл не меньшую роль, чем в период развития классической физики. Так, с помощью мысленного эксперимента была установлена относительность одновременности в различных инерциальных системах отсчета. Большую известность получил мысленный эксперимент Эйнштейна по анализу физических процессов в локально ускоренной системе отсчета — "лифт Эйнштейна". Он послужил началом для формулирования принципа эквивалентности сил инерции и гравитационных сил.

Мысленный эксперимент отличается как от реального эксперимента, так и от чисто логического рассуждения. Физический — реальный эксперимент обычно проводится в искусственно созданных условиях при одновременной изоляции изучаемого явления от влияния второстепенных причин. То же самое имеет место и в мысленном эксперименте. Однако то, что невозможно в реальном эксперименте (полная изоляция и т.п.), осуществляется в мысленном. Благодаря активности сознания мы завершаем при помощи мысленного эксперимента решение задач экспе-

римента реального. В мысленном эксперименте мы созерцаем действие, и он является методом объективного анализа. В нем осуществляется оперирование представлениями, т.е. телами в их идеальной форме с логической обработкой экспериментальной ситуации.

Разнообразие форм моделирования не исчерпывается перечисленными здесь. Моделирование в широком смысле есть не только эффективное средство для решения конкретных исследовательских и практических задач, но и эффективный гносеологический инструмент, обеспечивающий познание свойств и закономерностей объективной реальности.

### Л и т е р а т у р а

1. Неуймин Я.Г. Модели в науке и технике. - Л.: Наука, 1984. - 189 с.
2. Веников В.А., Веников Г.В. Теория подобия и моделирования. - М.: Высшая шк., 1984. - 438 с.
3. Печенкин А.А. Математическое обоснование в развитии физики. - М.: Наука, 1984. - 249 с.
4. Рузавин Г.И. Математизация научного знания. - М.: Мысль, 1984. - 206 с.

# С о д е р ж а н и е

	Стр.
<b>К.-С.К. Ребане</b>	3
<b>К.-С.К. Ребане.</b> О способах достижения разнообразия при изложении лекционного материала .....	4
П.Л. Куки, Р.Р. Лойде, Э.К. Рейтер. Уравнения квантовой физики .....	10
Ю.Я. Лембра. Некоторые методические приемы при преподавании атомной физики IX .....	16
П.Л. Куки, А.А. Гаврилов, Э.К. Рейтер. Об изложении проблемы гармонического осциллятора в курсе общей физики .....	24
О.И. Сильд. Геометрическая интерпретация правил отбора по квазиимпульсу в оптических переходах .....	28
У.Х. Мельдер. Химическая связь. Физическое обоснование и классификация .....	35
О.В. Сакс. О векторной модели электрона со спином .....	43
А.Я. Паз, А.А. Хаав. Об истории рентгенографических исследований в Тартуском университете .....	51
Х.И. Воолайд. Электронная теория дисперсии в курсе общей физики .....	56
Т.Э. Ваякас, Э.Х. Келк, М.А. Фишер, М.М. Фишер, Ю.Ю. Халдре, Э.Ю. Ютс. Комплект учебных пособий для преподавания курса микропроцессорной техники .....	61
И.Р. Пийр. К выводу преобразований Лоренца .....	67
Я.И. Сальм. Теоретические основы лабораторной работы по определению вязкости жидкости из крутильных колебаний диска .....	77
Э.Н. Бихеле, Г.А. Бихеле. Вопросы моделирования и теории подобия в общей физике I ....	83